



ХАРЬКОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ В.Н. КАРАЗИНА

V.N. KARAZIN KHARKOV
NATIONAL UNIVERSITY

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**ДИНАМИКА И СТРУКТУРА
В ФИЗИКЕ И ХИМИИ**

К 70-ЛЕТИЮ

И.В. КРИВОШЕЯ (1939-1995)

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL CONFERENCE

**DYNAMICS AND STRUCTURE
IN PHYSICS AND CHEMISTRY**

TO THE 70-TH ANNIVERSARY
OF I.V. KRIVOSHEY (1939-1995)

BOOK OF ABSTRACTS

ХАРЬКОВ
25–28 МАЯ 2009

KHARKOV
MAY 25–28

УДК 53+54
ББК 22.3+24

Научный комитет:

чл.-кор. НАНУ Залюбовский И. И.
(председатель);
акад. РАН Захаров В. Е.;
проф. Коробов А. И. (ученый
секретарь);
проф. Кошкин В. М.;
проф. Левин А. А.;
проф. Лузанов А. В.;
проф. Оболенский М. А.;
проф. Орлов В. Д.;
акад. НАНУ Пастур Л. А.;
проф. Уманский С. Я.;
проф. Холин Ю. В.;
проф. Шуб Б. Р.

Организационный комитет:

проф. Коробов А. И.
(председатель);
доц. Калугин О. Н.
(сопредседатель);
доц. Завгородний А. А.;
доц. Иванов В. В.;
проф. Оболенский М. А.;
проф. Орлов В. Д.;
проф. Холин Ю. В.;
инж. Холодилова Л. Т.
(секретарь);
мнс Христенко И. В.;
проф. Шишкин О. В.

Динамика и структура в физике и химии. Международная научная конференция, посвященная 70-летию И. В. Кривошея. Тезисы докладов. – Х.: ХНУ им. В.Н. Каразина, 2009. – 87 с.

Сборник включает тезисы лекций, устных и стендовых докладов, представленных на Международную конференцию "Динамика и структура в физике и химии". Основные направления научной программы: регулярная и стохастическая динамика сложных систем (физика, химия, математика); теоретические модели ВТСП, Н-связанных кристаллических материалов, низкоразмерных систем; новые методы и подходы в химической физике и математической химии.

Dynamics and structure in physics and chemistry. International conference to the 70-th anniversary of I.V. Krivoshey. Book of abstracts. – Kharkov.: V.N. Karazin KhNU, 2009. – 87 p.

This book includes abstracts of lectures, oral and poster presentations at the International conference "Dynamics and structure in physics and chemistry". Scope: regular and stochastic dynamics of complex systems (physics, chemistry, mathematics), theoretical models of HTSC; H-bonded crystals, low-dimensional systems; new methods and trends in chemical physics and mathematical chemistry.

Динаміка і структура у фізиці та хімії. Міжнародна наукова конференція, присвячена 70-річчю І. В. Кривошея. Тези доповідей – Х.: ХНУ ім. В. Н. Каразіна, 2009. – 87 с.

Збірник містить тези лекцій, усних та стендових доповідей, які представлено на Міжнародну конференцію "Динаміка і структура у фізиці та хімії". Основні напрями конференції: регулярна та стохастична динаміка складних систем (фізика, хімія, математика); теоретичні моделі ВТНП, Н-зв'язаних кристалічних матеріалів, низькорозмірних систем; нові методи і підходи в хімічній фізиці та математичній хімії.

*Спасибо всем, случайным, как и я.
Я вас люблю светло и покаянно.
Как хорошо вернуться в океан
искавшей смысла капле океана*

Б. Чичибабин

Игорь Васильевич Кривошей, доктор химических наук, профессор. Из 56 лет яркой насыщенной жизни почти 40 связаны с Университетом – со времени поступления на химический факультет в 1957 году. После окончания работал ассистентом, доцентом, непродолжительное время заведовал кафедрой теоретической химии, и – до конца жизни – созданной им Лабораторией молекулярной динамики и структуры. В 1966 году одним из первых на Украине начал читать курс квантовой химии и организовал на химическом факультете новую специализацию по подготовке химиков-теоретиков. В 1975 году И.В. Кривошей защищает докторскую диссертацию и при активной поддержке директора ФТИНТа Б. И. Веркина создает на базе университета Отраслевую научно-исследовательскую лабораторию. Цель – изучение высокотемпературной сверхпроводимости. В начале 70-х надежды на прогресс в этой области связывались с синтезом новых органических комплексов с переносом заряда. Уникальную творческую и человеческую атмосферу Лаборатории неоднократно отмечали многие люди – как связанные с наукой, так и далекие от нее. В разные годы эту неповторимую атмосферу создавали и поддерживали В.П. Бабийчук, В. Батулин, А. Бойко, И.В. Владимирский, Л.В. Гаврилко, Ю. Галкин, М. Гарбер, И.М. Гелла, Е.М. Глузман, В.В. Гок, И.Ф. Головкина, В.Н. Голубь, В. Гончар, С.Г. Дедик, С. Дмитриевская, Э.М. Добрускина, Ю.И. Жорняк, В.И. Журавлев, А.В. Иванова, Н.Н. Имшенецкая, М.А. Калмыков, О.А. Корин, А.И. Коробов, С. А. Коротков, И.Г. Корсунская, Н.Л. Крамаренко, Е. Кричевский, Д.Б. Крупников, Г.Б. Литинский, А. В. Лузанов, Е. К. Маслова, В.М. Мотрич, А.П. Мохир, Н.В. Манзя, О.А. Нодельман, Ю. Оршанский, С. Пащенко, А.И. Роберман, Л.Н. Савенкова, В.А. Свиридова, В.М. Скоробогатов, Л. А. Слета, В. А. Стародуб, И. В. Степанюк, И. Е. Субботина-Бейдер, В.Э. Уманский, Е. Хоменко, О.М. Цыгулева, В.О. Черановский, В.А. Чернуха, С.А. Чуева, Н.М. Шкабара. В апреле 1977 году И.В. Кривошей избирается на должность заведующего кафедрой общей химии и преобразует ее в кафедру теоретической химии. В Лаборатории активно ведутся работы в области теоретического и экспериментального изучения высокотемпературной сверхпроводимости, химической динамики и динамического хаоса, разрабатываются топологические методы в задачах структурной и квантовой химии. В 1986 году Беднорцем и Мюллером была открыта высокотемпературная сверхпроводимость в керамиках. Это стало значительным этапом в деятельности Лаборатории. Многолетний опыт и химическая интуиция, которой так не хватало на первых порах физикам, позволили сразу же активно включиться в новую тематику ... к сожалению, совсем не надолго. "Мне бесконечно жаль моих несбывшихся мечтаний ..." – это из романса, который Игорь Васильевич нередко наигрывал и напевал, особенно в последние годы.

Избранные публикации И. В. Кривошей

И. В. Кривошей. Об определении числа стереоизомеров комплексных соединений. ЖСХ, **4**, 757 (1963).

И. В. Кривошей. Методы расчета чисел стереоизомеров в стехиометрии комплексных соединений. ЖСХ, **6**, 313 (1965); **7**, 657 (1966); **8** (1967).

И. В. Кривошей. Вычисление фундаментальных групп молекул катенанов и полимеров. ЖСХ, **9**, 285 (1968).

И. В. Кривошей, Л. А. Слета. Общие свойства многомерных потенциальных поверхностей химических реакций. ЖСХ, **10** (1969); **12** (1971); **13** (1972).

И. В. Кривошей. Методы алгебраической топологии в структурной химии. ЖСХ, **14** (1973).

И. В. Кривошей, В. М. Скоробогатов. Сопряженные неорганические полимеры на основе углерода. Успехи химии, **50**, 746 (1981).

В. А. Стародуб, И. В. Кривошей. Высокоанизотропные молекулярные твердые тела. Успехи химии, **51**, 764 (1982).

И. В. Кривошей. Риманова кривизна и стохастизация движения ядер в химической динамике. ЖСХ, **24**, 123 (1983).

И. В. Кривошей, Г. Б. Литинский, А. В. Лузанов. Неустойчивость и стохастизация при внутримолекулярном перераспределении энергии в химической динамике. Хим. физ., **4**, 759 (1985).

И. В. Кривошей. Индуцированное деление ядер: динамический хаос и время жизни составного ядра. Ядерная физика, **46**, 1017 (1987).

В. М. Скоробогатов, И. В. Кривошей. Структура и свойства высокопроводящих комплексов полиацетилена. Успехи химии, **57**, 832 (1988).

I. V. Krivoshey. Dynamic chaos and instability in barrier processes of chemical dynamics. Soviet Scientific Reviews, Section B: Chemistry Reviews, M. E. Vol'pin Ed., **11**, 123–256 (1988).

И. В. Кривошей. Механизмы образования и эстафетная динамика куперовских пар в высокотемпературных сверхпроводниках. ФНТ, **15**, 527, (1989).

И. В. Кривошей. Критерий неустойчивости в многомерных нелинейных гамильтоновых системах. ТМФ, **82**, 268 (1990).

I. V. Krivoshey and V. M. Skorobogatov. Polyacetylene and Polyarylenes; Synthesis and Conductive Properties. Gordon and Breach Sci. Publ., 1991.

I. V. Krivoshey. Cooper pair formation mechanism for high-temperature superconductors. ФНТ, **20**, 407–415 (1994).

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

Конференция будет проходить в аудитории имени академика Синельникова
в главном корпусе Университета; левое крыло, 7 этаж

25 МАЯ ПОНЕДЕЛЬНИК

- 9:00 Регистрация участников
- 12:00 ***Открытие конференции***
- 12:40 ***Механизмы образования куперовских пар в высокотемпературных сверхпроводниках по модели И.В. Кривошея***
Оболенский М.А. (ХНУ имени В. Н. Каразина)
Перерыв
- 14:00 Представление стендовых докладов
- 14:15 ***Немарковская модификация «Золотого правила» Ферми в применении к туннельной реакции в молекулярном кристалле***
Базилевский М. В. (Центр фотохимии, Москва)
- 14:45 ***Туннельные твердофазные реакции с переносом атома водорода. Влияние температуры и давления***
Трахтенберг Л.И. (Институт химической физики, Москва)
- 15:15 ***Проводимость нанокмползитов с ферромагнитными кластерами***
Кожушнер М.А. (Институт химической физики, Москва)
Перерыв
- 16:00 ***Метод переходного состояния в теории химических реакций: история и перспективы***
Уманский С.Я. (Институт химической физики, Москва)
- 16:30 ***Квантовая химия и наука о материалах***
Багатурьянц А. А. (Центр фотохимии, Москва)
- 17:00 ***Квантовая химия нанотрубок***
Дьячков П.Н. (ИОНХ, Москва)
- 17:15 ***Dynamics on the nanoscale: Time-domain ab initio studies of quantum dots and carbon nanotubes***
Prezhdo O. V. (University of Washington)

- 10:00 Представление стендовых докладов
- 10:15 ***Возможности квазиупругого рассеяния нейтронов и молекулярно-динамического моделирования в исследовании динамической структуры молекулярных и ион-молекулярных систем***
Калугин О.Н. (Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина)
- 10:45 ***Структура и динамика высоконцентрированных электролитных растворов внутри углеродных наноразмерных пор***
Чабан В.В. (Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина)
- 11:00 ***Моделирование микроструктуры ионных растворов на основе данных методов ядерной магнитной релаксации, квантовой химии и молекулярной динамики***
Чижик В.И. (Санкт-Петербургский государственный университет)
- 11:30 ***Изучение структуры и динамики растворов электролитов методом ЯМР -- анализ современных возможностей***
Матвеев В.В. (Санкт-Петербургский государственный университет)
- 11:45 ***Phase space diffusion in molecular liquids: non-stationary random walk model***
Nerukh D. (Cambridge University)
Перерыв
- 12:30 ***Римейк метода индексов возбуждения и коллективностей электронных состояний молекул***
Жикол О. А. (НТК "Институт Монокристаллов", Харьков)
- 12:45 ***Мультиреференсная теория связанных кластеров для заданного состояния***
Иванов В. В. (Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина)
- 13:00 ***Термодинамика кластеризации цис-моноеновых карбоновых кислот на поверхности раздела фаз вода/пар в рамках полуэмпирического метода РМЗ***
Высоцкий Ю. Б. (Донецкий национальный технический университет)
Перерыв
- 14:00 ***Димерная форма пероксинитрита***
Тулуб А. В. (Санкт-Петербургский государственный университет)
- 14:30 ***Динамика и кинетика первичных световых стадий фотосинтеза***
Еремин В.В. (МГУ)
- 15:00 ***Новая модель переноса энергии в природных и искусственных фотосистемах***
Белов А.С. (МГУ)
- 15:15 ***Влияние диссипации на фемтосекундную динамику переноса энергии в реакционных центрах фотосинтеза***
Глебов И. О. (МГУ)
- 15:30 ***Model of thioredoxin catalysis with force***
Pereverzev Y.V. (University of Washington)

- 10:00 Представление стендовых докладов
- 10:15 **Стохастическая динамика в потенциалах нетривиальной топологии**
Болотин Ю.Л. (ИТФ ННЦ ХФТИ, Харьков)
- 10:45 **Биллиарды и отражение от барьера**
Яновский В.В. (Институт монокристаллов, Харьков)
- 11:15 **Электрическая и магнитная структура квантового вихря в He II**
Назик В.Д. (ФТИНТ, Харьков)
- 11:30 **Теплоперенос в сложных органических соединениях в магнитном поле**
Песчанский В.Г. (ФТИНТ, Харьков)
- Перерыв
- 12:30 **Броуновские моторы в вязкой среде**
Розенбаум В. М. (Институт химии поверхности, Киев)
- 13:00 **Изменение парадигмы статистической физики**
Норман Г. Э. (Объединенный институт высоких температур, Москва)
- 13:30 **Одномерные модели ферромагнетиков на основе соединений переходных металлов**
Черановский В. О. (Харьковский национальный университет им. В.Н.Каразина)
- 14:00 **Фрактальная структура плотных систем с анизотропным взаимодействием**
Литинский Г.Б. (НТУ "Харьковский политехнический институт")
- 14:15 **Психология и экономика в динамике социума**
Кошкин В.М. (НТУ "Харьковский политехнический институт")
- Перерыв
- 15:30 **Трансформация целевых и внецелевых солитонов в модулированных системах**
Ковалев А.С. (ФТИНТ, Харьков)
- 16:00 **Freak Waves in Ocean**
Захаров В.Е. (ФИАН, Москва; University of Arizona, USA)
- 16:30 **Кинематика и динамика движения солитонов в системах Френкеля-Конторовой**
Михейкин И. Д. (Московский Университет Инженерной Экологии)
- 16:45 **Математические модели электродинамических структур: открытые волноводы и металлические линзы**
Гандель Ю. В. (Харьковский национальный университет им. В.Н.Каразина)
- Перерыв
- 17:30 **Приглашение к сотрудничеству**
Норман Г. Э. (Объединенный институт высоких температур, Москва)
- 17:50 **Олимпиада «Нанотехнологии – прорыв в будущее!» – новый образовательный проект Московского университета**
Еремина Е. А. (МГУ)

- 10:00 Представление стендовых докладов
- 10:15 *Адсорбционно-электрохимическое формирование пространственных структур в системе «активированный уголь-благородный металл»*
Тарасенко Ю.А. (Институт химии поверхности, Киев)
- 10:45 *Интеркаляционная химия дисульфида молибдена*
Новиков Ю.Н. (ИНЭОС, Москва)
- 11:00 *Квазивыврождение электронных состояний в системах низкой симметрии*
Стародуб В. А. (Харьковский национальный университет им. В.Н.Каразина)
- 11:15 *Обменное взаимодействие в соединениях $\text{CuSO}_4(\text{en}) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{CuSO}_4(\text{en}) \cdot 2\text{D}_2\text{O}$: роль водородных связей*
Андерс А.Г. (Харьковский национальный университет им. В.Н.Каразина)
- 11:30 *Vibrations of complex crystal lattices: model thermodynamics for $\text{La}_{2/3}\text{Ba}_{1/3}\text{MnO}_3$*
Безносов А.Б. (ФТИНТ, Харьков)
- Перерыв
- 12:30 *Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия наноксидов.*
Шуб Б.Р. (Институт химической физики, Москва)
- 13:00 *Электростатические аспекты адсорбции на поверхности оксидов*
Лобанов В.В. (Институт химии поверхности, Киев)
- 13:15 *Особливості внутрімолекулярних коливань молекули кисню адсорбованої на поверхні кристалічного кремнію*
Теребінська М.І. (Інститут хімії поверхні, Київ)
- Перерыв
- 14:30 *Топология в физике, химии и биологии*
Франк-Каменецкий М.Д. (Boston University)
- 15:00 *Регулярные и случайные разбиения Дирихле в описании химических реакций на поверхности*
Коробов А. И. (Харьковский национальный университет им. В.Н.Каразина)
- 15:15 *Заккрытие конференции*

1. ***Сегнетоэлектрический переход в KH_2PO_4 (KDP) и его барическая зависимость: квантово-химическое моделирование***
Долин С. П., Михайлова Т. Ю., Бреславская Н.Н., Левин А. А. (ИОНХ, Москва)
2. ***Динамика волновых пакетов в потенциале Бэйна***
Михайлова Т. Ю., Пупышев В.И. (ИОНХ, МГУ, Москва)
3. ***Индексный подход к проблеме выбора активного пространства для мультиреференсных квантовохимических методов***
Лях Д. И., Иванов В. В. (ХНУ им. В. Н. Каразина)
4. ***Полуэмпирическая теория связанных кластеров. прогноз оптических свойств сопряженных молекул***
Клименко Т. А., Иванов В. В. (ХНУ им. В. Н. Каразина)
5. ***A quantum chemical study on hydrogen bonding and proton migration in indium(III) hydroxide nanoparticles***
Grebennyuk A.G. (A.A. Chuiko Institute of Surface Chemistry, Kiev)

1. ***Властивості подвійного зв'язку модифікованого активованого вугілля***
Яцимирський В.К., Биков Д.О., Дацюк А.М., Задерко О.М., Лобанов В.В., Діюк В.Є.
(Київський національний університет та Інститут хімії поверхні НАН України)
2. ***Квантово-химическое исследование металлоорганических красителей–сенситизаторов для солнечных батарей***
Барышников Г.В., Минаев Б.Ф., Минаева В.А. (Черкасский национальный университет)
3. ***Особенности асимптотических разложений анизотропных межмолекулярных взаимодействий вблизи сингулярной сферы. Модельный счёт для O_2 и паратерфенила.***
Штифанюк П.П., Федоряко А.П. (НТК «Институт монокристаллов», Харьков)
4. ***Комплекс программ для исследований QSAR***
Лях Д.И., Пантелеймонов А.В., Иванов В.В., Холин Ю.В.
(Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина)

1. *Распространение солитонов в активно-диссипативной среде, как проблема отображения*
Ковалев А.С., Перетяцько А.А. (Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина)
2. *Переходные процессы в дихотомных флуктуациях: диффузионный транспорт в вязкой среде*
Шапочкина И.В., Розенбаум В. М. (Белорусский государственный университет, Институт химии поверхности НАН Украины)
3. *Хаотические режимы АФМР в двумерном антиферромагнетике $(\text{NH}_3)_2(\text{CH}_2)_4\text{MnCl}_4$*
Хацько Е.Н., Богдан М.М., Кобец М.И. (ФТИНТ, Харьков)
4. *Обменный сдвиг полевой зависимости намагниченности в двухслойной модели ферромагнетика*
Панкратова М.Л., Ковалев А.С., Гречнев А.Г. (Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина)

1. *Рамановское рассеяние в кристалле металлоорганического соединения $(\text{CuSO}_4)(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$*
Ванькевич А.В., Таранова И.А., Андерс А.Г., Кравчина О.В (ХНУ и ФТИНТ, Харьков)
2. *New Liquid Crystalline Systems Exhibiting Blue Phases*
Shkolnikova N.I., Gella I.M., Kutulya L.A. (НТК «Институт монокристаллов», Харьков)
3. *Влияние сильных электрических полей на рост наноксидов платины и их взаимодействия с молекулярным водородом*
Гатин А.К., Гишин М.В., Шарова М.В. (Институт химической физики, Москва)
4. *Thermal behaviour of single crystals of deuterated ammonium perchlorate*
Majda D., Korobov A., Filek U., Sulikowski B., Midgley P., Vowles D., Klinowski J
5. *Эффекты кристаллического поля в колебаниях решетки $\text{Ln}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$*
Безносков А.Б., Логинов А.А. (ФТИНТ, Харьков)
6. *Низкоэнергетическая динамика кристаллической решетки $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.2}\text{Mn}_{1.2}\text{O}_3$: эффекты мягких потенциалов в ультразвуке*
Безносков А.Б., Паль-Валь П.П., Фертман Е.Л., Паль-Валь Л.Н. (ФТИНТ, Харьков)

МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ КУПЕРОВСКИХ ПАР В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ ПО МОДЕЛИ И.В. КРИВОШЕЯ

Оболенский М.А.

Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина

В 1989 г. в журнале «Физика низких температур» вышла статья И.В. Кривошея, озаглавленная «Механизмы образования и эстафетная динамика куперовских пар в высокотемпературных сверхпроводниках». В аннотации к тексту статьи было сказано следующее: «Предложена теоретическая модель, в которой кислород, входящий в решетку высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП), существует в виде обычного оксид-иона O^{2-} , двухатомного диамагнитного пероксид-иона O_2^{2-} (V_k -бицентр), нестехиометричного, свободно растворенного в решетке молекулярного кислорода O_2^0 и виртуального O_2^- . Два электрона на O_2^{2-} образуют связанную экситонную пару с двумя дырками Cu^{2+} . Динамическое взаимодействие пар осуществляется по эстафетному механизму в цепочке $O_2^{2-} - O_2^0$. Движение в цепочке вызывает движение коррелированной пары дырок в валентной зоне, что приводит к токовому сверхпроводящему состоянию в ВТСП. Вычислена критическая температура бозе-конденсации T_c , согласующаяся с наблюдаемой в эксперименте. Объяснены линейный температурный ход сопротивления, отсутствие изотопического эффекта, размытие сверхпроводящего перехода в магнитном поле. Предсказывается существование антисегнетоэлектричества и ступеньки на зависимости $T_c(y)$, где y - нестехиометрия.

В докладе обсуждается, насколько реальна эта модель в современных представлениях о природе высокотемпературной сверхпроводимости и есть ли аналогичные взгляды на химический аспект этой проблемы.

1. И.В. Кривошей. Механизмы образования и эстафетная динамика куперовских пар в высокотемпературных сверхпроводниках //ФНТ. – 1989. – с. 527 – 532.
2. К.В. Мицен, О.М. Иваненко. Фазовая диаграмма $La_{2-x}M_xCuO_4$ как ключ к пониманию природы ВТСП // УФН. – 2004. – т. 174, № 5. – с. 545 – 563.

NON-MARKOVIAN EFFECTS IN KINETICS OF QUANTUM TUNNELING REACTIONS PROCEEDING IN CONDENSED PHASE

M.V. Basilevsky¹, V.A.Tikhomirov², G.V. Davidovich², S.V. Titov², A.I. Voronin³

¹Photochemistry Center, Russian Academy of Science,
ul. Novatorov 7a, Moscow 119421, Russia

²L. Ya. Karpov Institute of Physical Chemistry,
ul. Vorontsovo pole 10, Moscow 105064, Russia

³Institute of Problems in Chemical Physics, Russian Academy of Science,
Chernogolovka, Moscow region 142432, Russia

The reformulation of the standard golden rule approach considered in this work for treating reactive tunneling reduces the computation of the reaction rate to a derivation of band shapes for energy levels of reactant and product states. This treatment is based on the assumption that the medium environment is actively involved as a partner in the energy exchange with the reactive subsystem but its reorganization effect is negligible. Starting from the quantum relaxation equation for the density matrix, the required band shapes are represented in terms of the spectral density function, exhibiting the continuum spectrum inherent to the interaction between the reactants and the medium in the total reactive system. The simplest Lorentzian spectral bands, obtained under Redfield approximation, proved to be unsatisfactory because they produced a divergent rate expression at low temperature. The problem is resolved by invoking a refined spectral band shape, which behaves as Lorentzian one at the band center but decays exponentially at its tails. The corresponding closed non-Markovian rate expression is derived and investigated taking as an example the photochemical H-transfer reaction between fluorene and acridine proceeding in the fluorene molecular crystal. The kinetics in this reactive system was thoroughly studied experimentally in a wide temperature range [1].

[1] B.Prass, D.Stehlik, I.Y.Chan, L.I.Trakhtenberg, V.I.Klochikhin, Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 102, 498 (1998)

ТУННЕЛЬНЫЕ ТВЕРДОФАЗНЫЕ РЕАКЦИИ С ПЕРЕНОСОМ АТОМА ВОДОРОДА. ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДАВЛЕНИЯ

Трахтенберг Л.И.

Институт химической физики им. Н.Н.Семёнова РАН, Москва

К настоящему времени известно большое число внутри- и межмолекулярных химических реакций с неаррениусовской кинетикой. Особый интерес представляют реакции с переносом атома водорода, которые в широкой области температур идут по туннельному механизму.

Для расчетов константы скорости туннелирования в конденсированной фазе необходимо знание многомерной поверхности потенциальной энергии изучаемой реакции. При этом должны быть учтены различные промотирующие движения реагентов, которые меняют потенциальный барьер, преодолеваемый туннелирующей частицей. Другим важным уточнением является учет реорганизации реагентов и среды, поскольку в результате реакции происходят заметные изменения расстояний между атомами и валентных углов между связями в молекулах. Особенно это важно для мономолекулярных реакций, поскольку реорганизация среды в этом случае является единственным механизмом температурной зависимости.

Проведен анализ механизмов температурной зависимости константы скорости для двух типов твердофазных туннельных химических реакций – перенос атома водорода между двумя молекулами и внутримолекулярный перенос. Для этого в рамках модифицированной теории безызлучательных переходов получено аналитическое выражение константы скорости переноса атома в твердом теле для непрерывного фононного спектра. Учтено влияние давления на расстояние между реагентами и частоту межмолекулярных колебаний. Развитая теория использована для интерпретации литературных экспериментальных данных по туннельному переносу атома водорода в двух реакциях: а) внутримолекулярный перенос водорода в молекуле муравьиной кислоты в условиях матричной изоляции в кристалле аргона; б) перенос водорода от молекулы флуорена к возбужденной молекуле акридина в кристалле флуорена.

Построены *ab initio* поверхности потенциальной энергии для обеих реакций, из которых получены параметры необходимые для расчета константы скорости. В обоих случаях наблюдалось согласие теории и экспериментальных данных при разумных значениях подгоночных параметров.

ПРОВОДИМОСТЬ НАНОКОМПОЗИТОВ С ФЕРРОМАГНИТНЫМИ КЛАСТЕРАМИ

Кожушнер М.А., Трахтенберг Л.И.

Институт химической физики им. Н.Н.Семёнова РАН, Москва

Развита теория проводимости композитов изолятора с нанокластерами ферромагнитных металлов, получена зависимость удельного сопротивления от температуры, электрического и магнитного полей. Проводимость осуществляется за счёт туннельных перескоков электронов между кластерами. Из-за того, что плотность состояний электронов в кластерах зависит от направления спина электрона по отношению к направлению намагниченности кластера, вероятность перескока зависит от направления спина, а ток – от величины магнитного поля, выстраивающего намагниченности отдельных кластеров, т.е. наблюдается явление гигантского магнитного сопротивления (ГМР).

У достаточно больших металлических кластеров, где $R_{cl} \geq 1$ нм, а именно такие кластеры здесь и рассматриваются, уровень Ферми E_F и магнитный момент, приходящийся на один атом ферромагнитного кластера, не зависят от размера кластера, поэтому скачки добавочного электрона по нейтральным кластерам не требуют теплового возбуждения. Однако, для того чтобы оторвать электрон от нейтрального кластера и переместить на другой кластер, требуется затратить энергию $\varepsilon_+ \leq e^2/R_{cl}$, порядка нескольких десятых эВ, т.е. много больше kT .

Можно выделить три чётко разделённых режима прохождения тока через систему кластеров: 1) режим слабого электрического поля, $eU_{if} \ll kT$, где U_{if} – средняя разность потенциалов между соседними кластерами; 2) режим сильного электрического поля, $\varepsilon_+ > eU_{if} \gg kT$; 3) режим сверхсильного электрического поля, $U_{if} > \varepsilon_+$. В первом режиме ток пропорционален равновесной концентрации добавочных электронов на нейтральных кластерах и прыжковой подвижности электронов, а элементарное сопротивление определяется обратной вероятностью прыжка. Во втором режиме электрон может прыгать по нейтральным кластерам только в сторону анода, и элементарное сопротивление – это сопротивление цепочки, начинающейся с ионизации кластера и серии скачков рождённого электрона по нейтральным кластерам. Третий режим аналогичен второму, но с более короткой цепочкой. Рассчитана зависимость удельного сопротивления от T и U_{if} для всех режимов.

Поскольку сопротивление цепочки кластеров складывается из отдельных элементарных сопротивлений, то и зависимость от магнитного поля следует искать именно для среднего элементарного сопротивления, а не для средней проводимости, как это делалось ранее и в результате получалось завышенное значение ГМС. Выведено выражение для ГМС плёнки композита. Численные расчёты показывают, что, например, для композитов, содержащих кластеры железа радиуса 3,3 нм, при комнатной температуре в поле $H = 1,25$ Кгс уменьшение сопротивления составляет 23 %

МЕТОД ПЕРЕХОДНОГО СОСТОЯНИЯ В ТЕОРИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ: ИСТОРИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Уманский С.Я.

Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва

Лекция посвящена истории развития метода переходного состояния. Этот метод, истоки которого восходят к началу прошлого века, вплоть до настоящего времени является основным методом расчета констант скорости термических химических реакций.

Описана эволюция метода переходного состояния от исходной идеи Марселена к первому практическому расчету константы скорости химической реакции, проведенный Вигнером еще без упоминания термина «переходное состояние» и к интуитивной формулировке Эйринга, Эванса и Поляни, где впервые появилось это понятие.

Обсуждается современное состояние метода. С одной стороны это состояние характеризуется тем, что стало окончательно понятна ограниченность этой теории. С другой же стороны в своей области применимости метод переходного состояния все более широко используется при численном атомистическом моделировании сложных химических процессов, которое становится одним из основных подходов к созданию новых технологий (горение, материалы для микроэлектроники). Это обусловлено, прежде всего, тем, что метод переходного состояния естественно включается в программные пакеты (в том числе коммерческие), используемые при таком моделировании, поскольку:

- требуется только информация о критических точках потенциальных поверхностей;
- расчеты констант скорости аналогичны расчетам термодинамических функций;
- термодинамическая формулировка метода переходного состояния позволяет разрабатывать правила аддитивности и тем самым существенно уменьшить объем квантовохимических расчетов.

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ И НАУКА О МАТЕРИАЛАХ

Багатурьянц А.А.

Учреждение Российской академии наук Центр фотохимии РАН, Москва

Рассмотрены основные проблемы применения методов квантовой химии для моделирования формирования, строения и свойств функциональных материалов для микро- и нано- электроники и фотоники. В качестве примера рассмотрено моделирование осаждения и роста тонких пленок с использованием квантовохимических расчетов и кинетического метода Монте-Карло, моделирование структуры и электронных свойств поверхностей и интерфейсов диэлектрических и полупроводниковых пленок, моделирование поверхностных реакций, предсказание возможных структур полиморфных материалов, предсказание свойств люминесцентных материалов. На примере моделирования материала чувствительного слоя для оптических хемосенсоров рассмотрена общая стратегия многомасштабного атомистического моделирования иерархически построенных наноструктурированных материалов для органической нанофотоники. Рассмотрены основные стадии такого моделирования: моделирование на молекулярном уровне, на супрамолекулярном уровне и моделирование на уровне наночастиц. Проанализированы проблемы, возникающие на каждой стадии моделирования, и обсуждены современные подходы к их решению. Показано, что на современном уровне развития теории многомасштабное атомистическое моделирование позволяет с достаточной степенью достоверности описывать и предсказывать основные функциональные свойства материалов для микро- и нано- электроники и фотоники.

Квантовая химия нанотрубок

П.Н. Дьячков

Институт общей и неорганической химии РАН, Москва

Для расчёта электронной зонной структуры нанотрубок разработан метод линеаризованных присоединённых цилиндрических волн. Мы исходим из одноэлектронной модели и маффин-тин приближения для электронного потенциала. Движение электронов ограничено цилиндрическим слоем толщиной порядка удвоенного атомного ван-дер-ваальсова радиуса элементов. Электронный спектр системы определяется свободным движением электронов в межатомном пространстве между цилиндрическими барьерами и рассеянием электронов на атомных центрах. Изучены зонные структуры и плотности электронных состояний изолированных нехиральных и хиральных одностенных углеродных нанотрубок. В случае нанотрубок, погружённых в полупроводниковую матрицу учитывалась возможность делокализация электронов нанотрубки в матрицу. В расчетах двустенных нанотрубок учитывалась возможность туннельного обмена электронами между стенками. Исследовано влияние допирования на свойства углеродных нанотрубок. Кроме углеродных, изучены свойства нанотрубок на основе гексагонального нитрида бора, в том числе бор-азотных нанотрубок с дефектами упаковки и изоэлектронными примесями. Проведены теоретические исследования сегментированных нанотрубок, представляющих собой комбинации звеньев из BN и SiC и показано, что комбинации колец BN-SiC-BN и SiC-BN-SiC могут существовать в виде гофрированных трубок, которые сохраняют прочностные свойства, характерные для карбидокремниевых нанотрубок. Методом молекулярного докинга определены зависимости строения и прочности комплексов одностенных ДНК с нанотрубками от нуклеотидного состава ДНК и диаметра нанотрубок.

Работа поддержана РФФИ (08-08-90411) и НАН Украины (0 26-08a).

ЛИТЕРАТУРА

1. D'yachkov P.N. and Makaev D.V. // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 081101(R).
2. D'yachkov P.N. and Makaev D.V. // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 1554428.
3. D'yachkov P.N. and Makaev D.V. // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 057743.
4. D'yachkov P.N. and Makaev D.V. // J. Phys. Chem. Solids. 2008. **69**, No 12.

DYNAMICS ON THE NANOSCALE: TIME-DOMAIN AB INITIO STUDIES OF QUANTUM DOTS AND CARBON NANOTUBES

Prezhdo O. V.

Department of Chemistry, University of Washington, Seattle, USA

Device miniaturization requires an understanding of the dynamical response of materials on the nanometer scale. A great deal of experimental and theoretical work has been devoted to characterizing the excitation, charge, spin, and vibrational dynamics in a variety of novel materials, including carbon nanotubes, quantum dots, conducting polymers, inorganic semiconductors and molecular chromophores. We have developed state-of-the-art non-adiabatic molecular dynamics techniques and implemented them within time-dependent density functional theory in order to model the ultrafast photoinduced processes in these materials at the atomistic level, and in real time.

Quantum dots (QD) are quasi-zero dimensional structures with a unique combination of molecular and bulk properties. As a result, QDs exhibit new physical properties such as carrier multiplication, which has the potential to greatly increase the efficiency of solar cells. The electron-phonon and Auger relaxation in QDs compete with carrier multiplication. Our detailed studies of the competing processes in PbSe QDs rationalize why carrier multiplication was first observed in this material.

The electron-phonon interactions in carbon nanotubes (CNT) determine the response times of optical switches and logic gates, the extent of heating and energy loss in CNT wires and field-effect transistors, and even a superconductivity mechanism. Our ab initio studies of CNTs directly mimic the experimental data and reveal a number of unexpected features, including the fast intrinsic intraband relaxation and electron-hole recombination, the importance of defects, the dependence of the relaxation rate on the excitation energy and intensity, and a detailed understanding of the role of active phonon modes.

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ В ТЕОРИИ Н-СВЯЗАННЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ: ПОДХОДЫ, МЕТОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Левин А. А., Долин С. П., Михайлова Т. Ю.

ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

Рассмотрено применение квантовохимических моделей и вычислительных методов в микроскопической теории водородно-связанных сегнетоэлектриков и антисегнетоэлектриков, основанной на формализме псевдоспинового гамильтониана. На примере материалов с различным химическим строением, пространственной структурой и размерностью сетки Н/Д-связей обсуждены методические проблемы, возникающие при вычислении параметров псевдоспинового гамильтониана, и их возможное решение. Описано использование этих параметров с целью объяснения и предсказания свойств структурных фазовых переходов парафаза - упорядоченная фаза, а также строения упорядоченной фазы для материалов разных типов.

Работа поддержана РФФИ, проект 08-03-00195.

ВОЗМОЖНОСТИ КВАЗИУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ И МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЯРНЫХ И ИОН-МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Калугин О.Н.¹, Адья А.К.²

¹Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина, г. Харьков

²The University of Abertay Dundee, Dundee, Scotland, UK

Благодаря малому характеристическому времени наблюдения ($\sim 10^{-12} - 10^{-9}$ с), а также большому значению поперечного сечения тепловых нейтронов на протонах (~ 80 барн) и значительному превышению некогерентной амплитуды рассеяния нейтронов над когерентной, метод квазиупругого рассеяния нейтронов предоставляет уникальные возможности для изучения особенностей атомной и молекулярной динамики в молекулярных жидкостях, содержащих атомы ^1H [1].

В настоящей работе с использованием метода квазиупругого рассеяния нейтронов (QENS) высокого разрешения исследована трансляционная и вращательная динамика молекул метанола ($\text{CH}_3\text{OH}/\text{CD}_3\text{OH}$) в чистом растворителе и в растворах NiCl_2 различной концентрации при 223, 260, 300 и 323 К.

Для выяснения взаимосвязи структурной организации жидкости и молекулярной динамики, а также установления применимости различных моделей трансляционной диффузии выполнено молекулярно-динамическое моделирование метанола и растворов хлорида никеля в нем с использованием авторского программного пакета MDNAES [2]. Валидация МД моделирования осуществлялась на уровне парных функций радиального распределения, полученных ранее по результатам дифракции нейтронов с изотопным замещением (NDIS) [3,4].

Особое внимание в работе уделено влиянию температуры и эффектов сольватации на характер молекулярной динамики растворителя и динамическую структуру растворов NiCl_2 в метаноле.

Список литературы

1. Л.А. Булавін, Т.В. Кармазіна, В.В. Клепко, В.І. Слісенко. Нейтронна спектроскопія конденсованих середовищ. Київ, Академперіодика, 2005, 570 с.
2. О.Н. Калугин, М.Н. Волобуев, Я.В. Колесник. *Вест. Харьк. ун-та. Химия*. 1999, № 454, Вып. 4 (27), с. 58.
3. O. N. Kalugin and A. K. Adya, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2000, V. 2, p. 11.
4. A.K. Adya and O.N. Kalugin, *J. Chem. Phys.*, 2000, V. 113, p. 4740.

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА ВЫСОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОЛИТНЫХ РАСТВОРОВ ВНУТРИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОР

В.В. Чабан, О.Н. Калугин

Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина

Особенности поведения концентрированного электролитного раствора в углеродной наноразмерной матрице представляют интерес как с точки зрения фундаментальной, так и прикладной науки. Возможность прогнозирования свойств электролита, как предполагается, позволит проводить более направленный поиск параметров систем, в частности, для использования в литий-ионных аккумуляторах и суперконденсаторах.

В докладе обсуждаются результаты молекулярно-динамического моделирования структурных и динамических свойств растворов тетрафторобората тетраэтиламмония и тетрафторобората лития с концентрациями 0.1М, 0.5М, 1.0М, 3.0М в ацетонитриле, помещенных внутрь углеродных наноразмерных пор (с диаметрами от 1 до 3 нм). Моделирование проведено при 298 К, в NVT ансамбле с шагом интегрирования уравнений движения 0.001 пс. После релаксации систем к равновесному состоянию в течении 2 000 пс проводилось накопления статистических средних в течении 5 000 пс.

Показан характер влияния размера нанопоры и концентрации электролита на самодиффузию молекул и ионов внутри. Проанализированы особенности структуры ионной подсистемы. Представляемые данные могут быть использованы при проектировании электрохимических устройств на основе систем «углеродный нанопористый материал-неводный электролитный раствор».

МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ ИОННЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ МЕТОДОВ ЯДЕРНОЙ МАГНИТНОЙ РЕЛАКСАЦИИ, КВАНТОВОЙ ХИМИИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Чижи́к В.И., Вовк М.А., Донец А.В., Павлова М.С., Егоров А.В.

Санкт-Петербургский государственный университет

Явление ядерной магнитной релаксации (ЯМР-релаксация) успешно используется при исследовании микроструктуры веществ в различных агрегатных состояниях [1]. В результате проведённых ранее исследований в нашей лаборатории был разработан метод определения параметров микроструктуры растворов электролитов на основе измерений скоростей релаксации ядер растворителя в зависимости от температуры и концентрации [2]. Была доказана способность многих ионов сохранять свою координацию при изменении концентрации и температуры раствора. Однако, микроструктура гидратных оболочек ионов, имеющих при низкой температуре ($<30^{\circ}\text{C}$) тетраэдрическую координацию, изменяется при повышении температуры в сторону увеличения координационных чисел (до 6 для Li^+ , до 8 в случае анионов Cl^- и Br^-). Эксперименты на резонансах квадрупольных ядер $^7\text{Li}^+$, ^{23}Na , ^{35}Cl подтвердили сделанные выводы. Эффект сохраняется и в присутствии органических молекул (в частности, белков).

Среди известных механизмов ЯМР-релаксации особое место занимает квадрупольное взаимодействие: в отличие от всех остальных механизмов релаксации в этом случае *магнитная* релаксация происходит в результате взаимодействия *электрического* квадрупольного ядра (который имеется только для ядер со спином $I > 1/2$) с неоднородным *электрическим* полем. Скорость квадрупольной релаксации пропорциональна квадрату произведения электрического квадрупольного ядра и градиента электрического поля (константа квадрупольной связи – ККС). Методом квантово-химических расчётов рассчитаны градиенты электрического поля и ККС ядер, входящих в различные молекулярные комплексы, результаты расчета сопоставлены с данными ЯМР-релаксации.

Метод молекулярной динамики использован для изучения координации ионов, а также для описания молекулярных движений, связанных с процессами магнитной релаксации ядер.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-03-00735).

1. В.И. Чижи́к. Ядерная магнитная релаксация. СПб, 3-е изд., 2004, 388 с.
2. V.I. Chizhik // Molec. Phys. 1997, v.90, № 4, p. 653-659.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ РАСТВОРОВ ЛЕКТОЛИТОВ МЕТОДОМ ЯМР – АНАЛИЗ СОВРЕМЕННЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ

Матвеев В.В.

Санкт-Петербургский государственный университет

Рассмотрены возможности многоядерного ЯМР для детального анализа структуры и динамики растворов электролитов различных типов. Дан краткий обзор работ 60-х и 70-х годов, когда с помощью спектров ЯМР на ядрах водорода при пониженной температуре были впервые обнаружены отдельные сигналы растворителя, находящегося в первой сольватной оболочке ряда катионов и, тем самым, впрямую доказано существование сольватных комплексов катионов со строго определенным координационным числом как структурных единиц раствора. Развитие метода и аппаратуры ЯМР за прошедшие десятилетия позволило использовать в подобных исследованиях и спектры других ядер растворителя, таких как кислород-17, азот-14, углерод-13 и др., а также расширить возможности наблюдения сигналов сольватных оболочек при более высоких температурах. Это иллюстрируется в докладе примерами из литературы последнего десятилетия.

Другой разновидностью метода ЯМР является так называемая релаксометрия. Измерения времен ЯМР-релаксации в растворах электролитов проводятся, начиная с 50-х годов, и за прошедшее время исследованы тысячи систем различного состава и при различных температурах. Скорости ЯМР-релаксации определяются поступательной и вращательной подвижностью ионов и молекул и являются эффективным методом изучения таких процессов. Современная аппаратура ЯМР позволяет детектировать сигналы практически от любого ядра, что позволяет изучать подвижности каждого компонента раствора: катиона, аниона, растворителя. Тем самым, ЯМР-релаксация является мощным инструментом изучения молекулярного движения в растворах электролитов. В докладе дается сжатый обзор указанных возможностей ЯМР-релаксации на примерах из литературы разных лет.

Получаемая из ЯМР информация о структуре и динамике частиц в растворах электролитов является эффективной базой данных для сравнения с результатами других экспериментальных методов и для тестирования применимости тех или иных способов описания электролитных систем. В частности, сопоставление с результатами компьютерного моделирования позволяет, с одной стороны, контролировать применимость тех или иных потенциалов взаимодействия, используемых при моделировании, а с другой - находить более адекватные модели строения и динамики исследуемых систем.

PHASE SPACE DIFFUSION IN MOLECULAR LIQUIDS: NON-STATIONARY RANDOM WALK MODEL

Dmitry Nerukh¹, Vladimir Ryabov², and Makoto Taiji³

¹Department of Chemistry, Cambridge University, Cambridge, UK

²Department of Complex System, Future University Hakodate, Japan

³Computational Systems Biology Group, RIKEN, Yokohama, Japan

It is commonly assumed that *the diffusion in the phase space* of simple liquids such as common solvents or small molecules in solution is *normal*. That is it is completely equivalent to the random Brownian motion, at least at the chemically relevant time scale. Here we test this hypothesis for MD simulated bulk water at room temperature (and other liquids). The standard correlation analysis and the diffusion coefficient do not reveal any difference from the normal diffusion case at the time scales greater than ~ 10 ps. Therefore, we utilize a novel information content analysis of very long ($\sim 1\mu$ s) phase space trajectories using the approach of Computational Mechanics (CM) based on the analysis of Markov chains with memory [Crutchfeld *et al*, *Phys. Rev. Lett.*, **63**, 105 (1989)].

For specific molecular signals (for example, the velocity of one atom) we consider the sequences that start at times $t-l$ and end at times t , with t covering the whole simulation period and l being the length of the sequences (3-15 time steps). The set of the sequences is an l dimensional projection of the molecular phase space trajectory. We calculate various statistics on the sequences. The results are compared to an artificial signal which is random by definition (constructed as a "surrogate", a very similar but purely random signal).

The conditional probabilities of the signal values following each sequence $P(\mathbf{v}_{t+1} | \{\mathbf{v}_{t-l} \dots \mathbf{v}_t\})$ show that the distributions are significantly different for the surrogate and the molecular signal and converge much slower in the latter case, at the scale of up to 1μ s. The analysis in the CM framework demonstrates that the CM statistic on the molecular signal *never converges* with t in contrast to the surrogate. This means that the convergence rate of the conditional probabilities for the molecular system is different compared to the surrogate, thus disproving the random, normal nature of the diffusion.

Contrary to the common view we find **significant deviations from the normal diffusion in the phase space** that clearly demonstrate non-random character of the dynamics. Unlike the normal diffusion where the molecular motions along any coordinate can be described by random Gaussian processes and, hence, are equiprobable, the molecular systems exhibit preferred routes in the phase space. We find that these routes change with time leading to long-term non-stationarity in the atomistic trajectories. We show that this non-stationarity can be reproduced using a stochastic model by modifying the usual random walk model with changing in time conditional probabilities.

РИМЕЙК МЕТОДА ИНДЕКСОВ ВОЗБУЖДЕНИЯ И КОЛЛЕКТИВНОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ

Лузанов А. В., Жикол О. А.

НТК "Институт Монокристаллов" НАН Украины, Харьков

Развитый свыше 30 лет назад инвариантный метод анализа электронных состояний (см. обзор [1]) распространен в последнее время на молекулярные волновые функции общего вида. В докладе рассматривается два типа проблем. Первая относится к мерам сложности или же отличия сравниваемых многоэлектронных состояний. Это приводит к обобщенным числам коллективности и родственным им индексам несходства, аналогичным индексам степени совпадения (fidelity measures), известным в квантовой теории информации. Соответствующие обобщенные индексы коллективности и их логарифмы использованы в качестве мер сложности электронных переходов и более общих коррелированных многоэлектронных состояний [2]. В общезначимом плане подобные меры особенно полезны при изучении молекулярного квантового спутывания (quantum entanglement), рассмотренного с этих позиций в [3].

Вторая проблема тесно связана с разрешаемой лишь неоднозначно задачей о структурно-химической характеристике волновых функций молекул. В докладе прежний метод индексов возбуждения из [1] обобщен с помощью частично-дырочного анализа общего вида [4], который позволяет ввести индексы локализации и переноса заряда для произвольных коррелированных многоэлектронных состояний. Подход детализирован для приближений типа ограниченного конфигурационного взаимодействия и родственных размерно согласованных моделей, известных в теории связанных кластеров (модели типа CCSD).

Для прикладной квантовой химии особенно важно распространить тот же анализ на возбужденные состояния, разумно описываемые временизависящей теорией функционала плотности (TDDFT). Необходимые обобщения [5] позволили создать подходящую алгоритмическую и вычислительную базу (в рамках стандартного пакета NWChem) и выполнить неэмпирический анализ возбужденных состояний для разнообразных молекулярных задач. В частности, выяснено, что ранее использованные π -электронные схемы чаще всего не противоречат более адекватным TDDFT результатам для сложных сопряженных молекул.

1. Лузанов А.В. Усп. химии 1980, 49, 2086.
2. Luzanov A.V. and Zhikol O.A. Int J Quant Chem 2005, 104, 167.
3. Luzanov A.V. and Prezhdo O.V. Mol Phys 2007, 105, 2879.
4. Luzanov A.V. and Prezhdo O.V. J Chem Phys 2006, 124, 224109.
5. Luzanov A.V. and Zhikol O.A. Int J Quant Chem 2009 (published online: 19 Mar 2009, DOI:10.1002/qua.22041).

МУЛЬТИРЕФЕРЕНСНАЯ ТЕОРИЯ СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ ДЛЯ ЗАДАННОГО СОСТОЯНИЯ

Иванов В.В.

Харьковский Национальный университет имени В. Н. Каразина,

Теория связанных кластеров (Coupled Cluster, CC) приобрела большую популярность в расчетах основного состояния молекулярных систем при равновесной геометрии. Обычно в этих расчетах используется метод CC, в котором учитываются однократные и двукратные возбуждения относительно одного референсного (хартри-фоковского, $|0\rangle$) детерминанта (CC Singles and Doubles, CCSD):

$$|\Psi_{\text{CCSD}}\rangle = \exp(T_1 + T_2)|0\rangle. \quad (1)$$

При этом операторы T_1 и T_2 формируют возбуждения соответствующей кратности. Однако при расчетах квазивырожденных состояний метод CCSD дает значительную погрешность, а часто и вовсе некорректные результаты (пр. диссоциация молекулы азота). В этих случаях оказывается оправданным переход к мультireференсной идеологии. Один из возможных вариантов такой теории реализован нами в методе CASCCSD (complete active space coupled cluster singles and doubles). Волновая функция нашего метода может быть представлена в форме:

$$|\Psi_{\text{CASCCSD}}\rangle = \exp(T_1^{(\text{ext})} + T_2^{(\text{ext})})(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + \dots), \quad (2)$$

где коэффициенты c_0, c_1, \dots характеризуют вклады различных референсных детерминантов $|0\rangle, |1\rangle, \dots$, а операторы $T_1^{(\text{ext})}$ и $T_2^{(\text{ext})}$ формируют соответственно однократные и двукратные возбуждения относительно них. Особенности нашего подхода заключаются в следующем: **1)** CASCCSD является теорией для одного заданного состояния (в отличие, например, от т.н. валентно-универсального метода, в котором делается одновременный расчет ряда состояний). Орбитальным базисом служат CASSCF MO целевого состояния. **2)** Все необходимые референсные детерминанты, а также возбуждения относительно них, формируются с помощью одного, так называемого “формально-референсного” состояния.

Первоначально метод CASCС предложен нами для расчета основного состояния (J. Chem. Phys. 2000, **112**, P.9258) и, затем, обобщен для случая возбужденных состояний (J. Chem. Phys. 2006, **124**, 184302). Тестовые расчеты поверхностей потенциальных энергий ряда молекул (в сравнении с методом полного конфигурационного взаимодействия) свидетельствуют о значительной точности CASCCSD (~ 1 -2 ккал/моль) как для основного, так и для возбужденных состояний.

ТЕРМОДИНАМИКА КЛАСТЕРИЗАЦИИ ЦИС-МОНОЕНОВЫХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ НА ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ФАЗ ВОДА/ПАР В РАМКАХ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОГО МЕТОДА PM3

Высоцкий Ю. Б., Беляева Е. А.

Донецкий национальный технический университет

Цис-моноеновые карбоновые кислоты широко распространены в природе, тогда как доля транс-кислот незначительна. Поэтому в данной работе проводился расчет термодинамических параметров кластеризации на поверхности раздела фаз вода/пар более распространенных *цис*-кислот. В качестве модельных систем были выбраны кислоты с ($\Delta=12\div15$, $\omega=6\div11$) (см. рис.1). Воспользовавшись рассчитанными ранее параметрами насыщенных карбоновых кислот [1], были построены исходные структуры мономеров, которые, после оптимизации, использовали для построения кластеров (димеров, тримеров, тетрамеров). Для двух устойчивых конформаций мономеров были рассчитаны энтальпия и свободная энергия образования, абсолютная энтропия. Было показано, что для мономеров с одинаковой

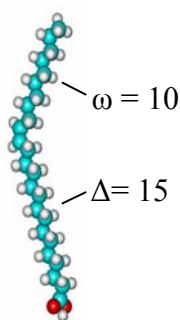


Рис.1

длиной цепи, но различными Δ и ω , рассчитанные термодинамические параметры совпадают в пределах погрешности.

Для трех конформаций димеров, двух – тримеров, трех – тетрамеров рассчитали энтальпию, энтропию и энергию Гиббса кластеризации. Как и в случае мономеров, термодинамические параметры кластеризации ассоциатов с равной длиной цепи, но различным положением двойной связи в ней совпадают. В кластерах с четным Δ ($\Delta=12, 14$) за счет их стерических особенностей образуются дополнительные

межмолекулярные взаимодействия, вносящие дестабилизирующий эффект в энергию Гиббса кластеризации. На основе рассчитанных параметров кластеризации построена аддитивная схема, позволившая

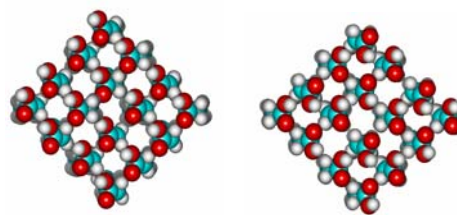


Рис. 2

оценить параметры кластеризации ассоциата любой сложности, в том числе бесконечной 2D-пленки. На основании полученных структур кластеров можно предположить существование двух типов бесконечных регулярных пленок (см. рис.2). Самопроизвольная кластеризация моноеновых кислот с нечетным Δ начинается при длине радикала 17-18 атомов углерода, а для кислот с четным Δ – при 18-19 атома углерода в цепи, что хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

1. Vysotsky, Yu. B.; Muratov, D. V.; Boldyreva, F. L.; Fainerman, V.B.; Vollhardt, D.; Miller, R. *J. Phys. Chem. B* **2006**, *110*, 4717.

ДИМЕРНАЯ ФОРМА ПЕРОКСИНИТРИТА

Симон К. В., Тулуб А.В.

Санкт-Петербургский государственный университет

Анион $(\text{ONOO})^-$, известный под названием пероксинитрита, характеризуется синглетным спиновым состоянием. В приближении квантовохимического метода CASSCF установлена новая стабильная димерная $[\text{NO}-\text{O}_2]^-$ форма пероксинитрита в триплетном состоянии в области расстояний между кислородом в структуре O_2 и азотом $r(\text{O}-\text{N}) \cong 2.885 \text{ \AA}$. Колебательное движение димера является существенно ангармоническим, в случае изотопов ^{16}O и ^{14}N разности энергий двух соседних уровней характеризуются частотами в области $(70-30) \text{ см}^{-1}$. Триплетная димерная структура сохраняет стабильность при учете взаимодействия с молекулами воды. Найдены активационные барьеры, возникающие при перегруппировке пероксинитритной структуры в основное состояние аниона NO_3^- симметрии D_{3h} . Обсуждаются возможные биохимические следствия существования димерной формы пероксинитрита.

ДИНАМИКА И КИНЕТИКА ПЕРВИЧНЫХ СВЕТОВЫХ СТДИЙ ФОТОСИНТЕЗА

Еремин В.В.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Для преобразования световой энергии природа создала эффективные супрамолекулярные аппараты. Фотосинтетические устройства (ФСУ) – это сложные наноструктуры, состоящие из нескольких сотен хромофоров, погруженных в белковое окружение. Они поглощают свет и направляют преобразованную световую энергию к реакционному центру, где происходит разделение зарядов и создается электрический потенциал, используемый в последующих темновых стадиях.

Эффективность переноса энергии в природных ФСУ определяется большим числом согласованных между собой факторов: структурных (размеры, взаимное расположение и ориентация молекул), энергетических (уровни энергии основного и возбужденных электронных состояний) и динамических (времена движения, времена жизни и вероятности переходов).

Первичные световые стадии фотосинтеза включают большое число элементарных процессов, характеризующихся широким спектром времен. Многие элементарные стадии переноса энергии между хромофорами происходят с высокими скоростями за времена порядка нескольких сотен фемтосекунд и имеют когерентный характер. Модели, описывающие соответствующие электронно-колебательные переходы, имеют квантовый характер и опираются на решение уравнений квантовой динамики. В случаях более медленных переходов, от пикосекунды и больше, когда время переноса энергии электронного возбуждения сравнимо со временем колебательной релаксации, возможно использование методов формальной кинетики и даже классической механики для оценки влияния структурных и энергетических факторов на характер динамического поведения системы.

В лекции на примере ФСУ пурпурных бактерий рассмотрены:

- 1) механизмы переноса энергии между хромофорами в ФСУ;
- 2) роль белкового окружения;
- 3) математические методы, используемые для описания динамики и кинетики переноса энергии и переноса электрона в ФСУ;
- 4) различные архитектуры ФСУ, включая модельные, с целью сравнения их эффективности, скорости переноса энергии и устойчивости к повреждениям.

Работа поддержана РФФИ, грант 09-03-00889

НОВАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ В ПРИРОДНЫХ И ИСКУССТВЕННЫХ ФОТОСИСТЕМАХ

Белов А.С., Еремин В.В.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Фотосистемы – молекулярные устройства, преобразующие свет в электрический потенциал, – одни из самых популярных объектов в физико-химической биологии. Высокая эффективность процессов переноса энергии в фотосистемах определяется их сложным строением. Они состоят из набора хромофоров, находящихся в белковом окружении. Для синтеза эффективных искусственных фотосистем необходима теоретическая основа, описывающая связь между их свойствами и строением.

В процессах переноса энергии существенную роль играет диссипация энергии в белковое окружение. Основные уравнения квантовой теории диссипации – уравнения Редфилда – описывают скорость изменения элементов редуцированной матрицы плотности:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{kl} = -i\omega_{kl}\rho_{kl} - \sum_{m,n} \rho_{mn} R_{klmn},$$

где R_{klmn} – элементы тензора Редфилда, равные, по сути, потенциалу взаимодействия хромофоров и окружения, усредненному по колебательным степеням свободы последнего [1].

В работе предложен новый способ вычисления элементов тензора Редфилда, основанный на использовании оператора взаимодействия между хромофорами и окружением в диполь-дипольном приближении. Использование модели гармонического осциллятора для описания колебательных мод окружения позволило получить аналитическое выражение для этих элементов, включающее как характеристики системы хромофоров (их расположение и молекулярные параметры), так и характеристики окружения (температура и ИК-спектр) [2].

Для проверки корректности данных приближений была смоделирована динамика переноса энергии возбуждения в фотосистеме пурпурных бактерий, для которой имеется большой набор спектральных данных. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными доказало адекватность модели. На основании описанной модели была изучена динамика переноса энергии в нескольких модельных искусственных фотосистемах, имеющих качественно различное пространственное строение. По результатам расчетов изученные структуры были ранжированы по соотношению квантовый выход – скорость переноса.

[1] Блум К. Теория матрицы плотности и ее приложения. М.:Мир, 1983.

[2] Белов А.С., Еремин В.В. Вестник Моск. ун-та. Сер. Химия, 2009, т. 50, в печати.

Работа поддержана РФФИ, грант 09-03-00889

ВЛИЯНИЕ ДИССИПАЦИИ НА ФЕМТОСЕКУНДНУЮ ДИНАМИКУ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ В РЕАКЦИОННЫХ ЦЕНТРАХ ФОТОСИНТЕЗА

Глебов И. О., Еремин В.В.

Химический факультет МГУ, г. Москва

При теоретическом описании динамики сверхбыстрых химических реакций в биологических системах необходимо учитывать эффекты диссипации, которые приводят к потере когерентности и релаксации колебательной энергии. Для описания таких процессов используют методы квантовой теории диссипации, например теорию Редфилда [1], основанную на формализме редуцированной матрицы плотности.

В данной работе рассмотрен ряд задач, возникающих при описании диссипативных процессов на квантовом уровне.

1) Рассмотрена задача о динамике гауссова волнового пакета в одномерном гармоническом осцилляторе, взаимодействующем с термостатом [2]. Получены замкнутые выражения для элементов тензора Редфилда, что позволило найти в явном виде зависимость средней колебательной энергии от времени. Показано, что энергия убывает экспоненциально, причем показатель экспоненты определяется спектральной функцией термостата.

2) Рассмотрена колебательная динамика неадиабатического перехода между двумя взаимодействующими электронными состояниями в молекулярной системе, находящейся в тепловом окружении [3]. Использованы различные модели взаимодействия с термостатом. На основе проведенных расчетов показано влияние температуры и амплитуды взаимодействия с тепловым окружением на динамику перехода между электронными состояниями.

3) Построена модель, позволяющая рассчитать спектральную функцию взаимодействия реакционной системы с термостатом по кристаллографическим данным о структуре белкового окружения. Проведенный расчет дает качественное согласие с экспериментом – рассчитанные предложенным методом спектральные функции для переноса электрона по ветви А и В реакционного центра фотосинтеза пурпурных бактерий показывают существенное различие в скорости релаксации энергии, что позволяет объяснить селективность протекания процесса переноса электрона по ветви А.

1. Weiss U. Quantum dissipative systems, 2nd ed., World Scientific, Singapore, 1999.
2. Еремин В.В., Глебов И.О. - Теор. мат. физика, 2007, т. 153, № 1, с. 130-144.
3. Глебов И.О., Еремин В.В. - Ж. физ. химии, 2008, т. 82, №4, с. 684-689.

Работа поддержана РФФИ, грант 09-03-00889

MODEL OF THIOREDOXIN CATALYSIS WITH FORCE

Pereverzev Y.V. and Prezhdo O.V.

Department of Chemistry, University of Washington, Seattle, USA

A novel theoretical model is proposed in order to rationalize the effect of external force in activating the rupture of chemical bonds (Wiita, A.P. et al. *Nature* **2007**, 450, 124). The experiments focused on the thiol/disulfide bond exchange with the associated reduction of disulfide bonds in a protein subjected to a force. The force was applied to a chain of 8 repeated units of the 27th immunoglobulin-like domain of cardiac titin (I27). The 32nd and 75th residues in each domain were connected by a disulfide bond. When the system was subjected to a 165 pN force for 400 ms, all eight units partially opened up to the disulfide bonds. Further extension of the system became possible when the thioredoxin enzyme (Trx) was added to the solution. The original partial domain opening was essential to allow Trx to access the disulfide bonds. Subjected to forces within the range of 30÷600 pN and in the presence of Trx, the disulfide bonds broke, and the system continued to extend for up to 4 s. The characteristic extension time, closely to the disulfide bond lifetime, exhibited an anomalous dependence on the strength of the applied force. As the force increased, the bond lifetime first grew and then decreased. This type of force dependence is indicative of catch-binding that is receiving intense attention in the recent years.

The proposed model is based on the well-known Michaelis-Menten kinetic mechanism, in which the disulfide bond binds to the enzyme and dissociates. Considering the 3 states of the catalytic mechanism involving I27 and Trx, i.e. the initial free state, the intermediate bound state and the final broken-bond state, we solve the general kinetic model. Analysis of the experimental data using the model indicates that the bond lifetime strongly depends on both force magnitude and enzyme concentration. These quantities are closely and enter the reaction rate constant as a product. The analysis suggests that the transition time from the intermediate to the final state is significantly shorter than the other time-scales. The first step involving the binding of the enzyme to the disulfide bond under the action of applied force governs the overall bond dissociation process. The anomalous force dependence of this step is rationalized in terms of the bond deformation concept introduced in reference (Pereverzev, Y.V.; Prezhdo, O.V. *Phys. Rev. E* **2006**, 73, 050902(R)). Analysis of rupture of a single disulfide bond is generalized to the chain of bonds, and the parameters of the proposed model are obtained by comparison with the experiment.

РИДБЕРГОВСКИЕ АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ В СРЕДЕ НЕЙТРАЛЬНЫХ ЧАСТИЦ

Голубков Г.В., Голубков М.Г., Иванов Г.К.
ИХФ РАН им. Н.Н. Семенова, Москва

Доклад посвящен изложению современных методов расчета собственных значений энергии ридберговских атомов A^{**} и молекул XU^{**} , возмущенных нейтральными частицами среды, а также результатов исследования процессов взаимодействия с ними. Интерес к их изучению связан с многочисленными приложениями в плазмохимии, аэронауке и астрофизике. Эти методы основаны на применении интегрального варианта теории, которая использует аппарат функций Грина. Вследствие близости границы сплошного спектра они не могут быть корректно описаны с помощью обычной квантовой химии. Если радиус электронного облака возбужденных частиц является достаточно большим (т.е. $R_c = 2n^2 \gg 1$, где n – главное квантовое число), то их нельзя считать изолированными даже в случае разреженного газа. Причем искажение спектра является наиболее сильным, когда число возмущающих нейтральных частиц N , попадающих внутрь этой области, больше единицы.

Обсуждается обобщенный метод потенциала конечного радиуса (ПКР), который самосогласованно учитывает короткодействующие и далекодействующие взаимодействия в рассматриваемой двухцентровой системе. Он адекватно описывает рассеяние слабосвязанного электрона на ионном остове и возмущающем атоме с отличными от нуля угловыми моментами l и L относительно этих центров, что позволяет распространить теорию на промежуточные (порядка и меньше длины волны электрона $\lambda \approx n$) межатомные расстояния R . В качестве приложения теории проведен детальный анализ особенностей поведения поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) системы, состоящей из высоковозбужденного атома $A^{**}(n, l)$ и нейтрального атома B с заполненной электронной оболочкой. Показано, что учет отличных от нуля моментов L для $e^- - B$ рассеяния приводит к дополнительному расщеплению ППЭ системы на отдельные группы взаимодействующих термов, классифицируемых по проекции m углового момента электрона l на квазимолекулярную ось. На расстояниях $R \gg n$ метод ПКР строго переходит в модель псевдопотенциала нулевого радиуса (ПНР) и, соответственно, к асимптотической теории, в рамках которой поверхности потенциальной энергии (ППЭ) приобретают простой аналитический вид.

СТОХАСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА В ПОТЕНЦИАЛАХ НЕТРИВИАЛЬНОЙ ТОПОЛОГИИ

Ю.Л. Болотин
ИТФ ННЦ ХФТИ

В докладе изложены результаты исследований классического детерминированного хаоса и квантовых проявлений классической стохастичности (КПКС) в двумерных нелинейных системах с нетривиальной формой потенциальной поверхности, то есть такой, которая обладает двумя или более локальными минимумами. Работы в этом направлении были начаты совместно с И. В. Кривошеем в 80-е годы. Нелинейные модели со сложной многоямной формой потенциальной поверхности представляют собой ситуацию общего положения и служат эффективной моделью для описания таких важных физических процессов, как химические реакции, фазовые переходы, ядерные реакции и распад деформированных ядер. Наиболее общим видом классической динамики в таких системах является так называемое смешанное состояние, которое характеризуется тем, что при одной и той же энергии в одних минимумах наблюдается регулярное движение, а в других — хаотическое. Эта особенность многоямных потенциалов требует пересмотра традиционных критериев стохастичности и значительно усложняет нахождение критических параметров перехода к хаосу. Наличие в многоямных потенциалах смешанного состояния существенно расширяет возможности обнаружения КПКС. В частности, потенциалы такой топологии позволяют обнаружить КПКС на уровне всего лишь одной волновой функции, а не при использовании ансамбля функций, как это имеет место в традиционных методах. В смешанном состоянии существенно изменяются и статистические свойства энергетических спектров: в этом случае мы имеем дело не со статистикой смеси двух систем с различными статистиками уровней (Пуассон и Вигнер), а с ансамблем уровней, каждый из которых не может быть связан с определенной статистикой. Статистические свойства таких систем исследованы крайне скудно, хотя именно такие системы отвечают ситуации общего положения. В докладе приводятся результаты изучения надбарьерной динамики в многоямных двумерных потенциалах. Показано, что в этом случае реализуется принципиально новый закон распада локализованных состояний, представляющий как концептуальный, так и прикладной интерес.

1. V.P. Berezovoj, Yu.L. Bolotin, V.A. Cherkaskiy, Signatures of quantum chaos in wave function structure, Phys. Lett. A 323, (2004)218.
2. Ю.Л.Болотин, А.В.Тур, В.В.Яновский. Конструктивный хаос, Харьков, 2005.
3. Yu.L. Bolotin, V.A. Cherkaskiy, G.I. Ivashkevych, Decay of the mixed states, Phys. Lett.A 372 (2008) 4080

БИЛЛИАРДЫ И ОТРАЖЕНИЕ ОТ БАРЬЕРА

В.В.Яновский, А.В.Тур

Институт монокристаллов НАНУ

Center D'etude Spatiale Des Rayonnements,

C.N.R.S.-U.P.S., 9, avenue Colonel-Roche 31028 TOULOUSE CEDEX 4.

Биллиарды относятся к важному классу физических динамических систем. Такие системы порождаются свободным движением и простейшим законом зеркального отражения от границ. Несмотря, а возможно и благодаря своей простоте биллиарды играют важную роль в физике. Хорошо известно, что концепция детерминированного хаоса в классической механике неразрывно связана с биллиардами. Более того, биллиарды оказались полезной теоретической моделью для развития концепции квантового хаоса. Именно с исследованиями биллиардов связан основной прогресс в понимании эргодичности статистической физики. Хорошо известны и многочисленны физические приложения биллиардов к реальным физическим системам. Так среди наиболее известных, следует упомянуть резонаторы и волноводы -- акустические, оптические и микроволновые; квантовые точки и сверхпроводящие андреевские биллиарды; газ Лоренца; нуклоны в короткодействующем потенциале атомного ядра и магнито-оптические ловушки <<холодных атомов>>; а также светособирание в сцинтилляционных детекторах. Еще одному направлению применения идеологии биллиардов и посвящен этот доклад.

В докладе обсуждается одна из широко распространенных в физике концепция точечной частицы. Однако, в ряде случаев вызывают интерес свойства частиц, которые зависят от ее внутреннего устройства и размеров. Такие частицы уже нельзя рассматривать как точечные и влияние ее устройства, т.е. внутренних степеней свободы могут приводить к необычному поведению. Особый интерес представляет частица с небольшим числом внутренних степеней свободы, когда ее свойства зависят от их числа. В докладе обсуждается простая модель структурно-сложной частицы с внутренними степенями свободы и описаны простейшие кинематические и динамические свойства такой частицы. Детально анализируется процесс столкновения структурно-сложной частицы с одной внутренней степенью свободы с барьером. Показано, что при отражении такой частицы могут наблюдаться как полное охлаждение внутренней степени свободы, так и ее <<нагрев>>. Вычислены основные характеристики столкновения, такие как длительность столкновения, число столкновений за время взаимодействия и скорости оболочки и внутренней частицы после столкновения. Показано, что при столкновении структурно-сложной частицы с барьером появляются свойства характерные для хаотического рассеяния.

ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ И МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА КВАНТОВОГО ВИХРЯ В He II

В.Д. Нацик

ФТИНТ им. Б.И. Веркина НАН Украины

Обсуждается спонтанная электрическая и магнитная поляризация квантованного вихря в сверхтекучем ^4He (фаза He II) как следствие взаимной электрической поляризации атомов и неоднородного распределения атомной плотности в сердцевине вихря. Два атома на расстоянии R вследствие отталкивания электронных оболочек приобретают одинаковые по величине и противоположно направленные дипольные моменты $d_a(R) \sim R^{-4}$ [1]. В жидкости средний дипольный момент на отдельном атоме $\langle d_a \rangle \sim \int n(\mathbf{r})$ (усреднение по быстро флуктуирующим атомным конфигурациям), поэтому макроскопическая поляризация возникает при наличии в ней стабильных неоднородных отклонений атомной плотности $n(\mathbf{r})$ от среднего значения n_0 . Такая неоднородность существует в сердцевине квантованного вихря в He II. Азимутальному течению $\mathbf{V}_s(\mathbf{r})$ вокруг линии вихря (орт \mathbf{s}) с квантом циркуляции κ соответствует радиально симметричное распределение $n(\mathbf{r})$ и поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ в перпендикулярном направлении $\mathbf{r} = \nu r$ (орт ν) [2]:

$$P(r) = n(r) \langle d_a \rangle \approx \nu \frac{8d_0 r_0^2}{3a_0^2 r^3} \exp\left[-\left(\frac{r_0}{r}\right)^2\right], \quad r_0^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{2\pi c_1}\right)^2;$$

здесь $a_0 = n_0^{-1/3}$ – среднее межатомное расстояние, $d_0 = d_a(R = a_0)$ – поляризация двух атомов на этом расстоянии, c_1 – скорость первого звука.

Движение атома-диполя в потоке жидкости $\mathbf{V}_s(\mathbf{r})$ индуцирует также средний магнитный момент $\langle \mu_a \rangle = sc^{-1} V_s \langle d_a \rangle$ (c – скорость света). Вследствие симметрии $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ интегральный дипольный момент у вихря отсутствует, но любой элемент его линии длиной L несет на себе квадрупольный Q_{ik} и магнитный \mathbf{M} моменты

$$Q_{ik} = (\delta_{ik} - 3s_i s_k) L \frac{4k^2 d_0}{6\pi c_1^2 a_0^2} \ln \frac{r_e}{r_0}, \quad \mathbf{M} = sL \frac{4k d_0}{3c a_0^2}$$

где r_e – внешний радиус вихря. Для атомов ^4He $d_0 \approx (4 \cdot 10^{-4})e$ (e – заряд электрона) и спонтанная поляризация вихрей является весьма слабой, но она интересна как один из примеров макроскопических квантовых эффектов в конденсированных средах.

1. Локтев В.М., Томченко М.Д. *ФНТ* **34**, 337 (2008).
2. Нацик В.Д., *ФНТ* **33**, 1319 (2007); *ФНТ* **34**, 625 (2008).

ТЕПЛОПЕРЕНОС В СЛОЖНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

О.Галбова¹⁾, О.В.Кириченко²⁾, В.Г.Песчанский^{2,3)}

¹⁾Институт физики университета св. Кирила и Мефодия, Скопье, Македония

²⁾Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина НАНУ

³⁾Харьковский национальный университет им. В.Н.Каразина

В шестидесятые годы резко возрос интерес к органическим проводникам в связи с идеей Литтла[1] о возможной реализации высокотемпературной сверхпроводимости в одномерных полимерных цепочках. Несмотря на то, что эта идея не получила экспериментального подтверждения, совместные усилия химиков и физиков привели к созданию нового класса органических солей, обладающих резко анизотропной металлической электропроводностью [2,3]. Значительный вклад в решение этой проблемы принадлежит сотрудникам межведомственной лаборатории молекулярной динамики и структуры, созданной И.В. Кривошеем и Б.И. Веркиным [3]. Для понимания механизма образования сверхпроводящего состояния в органических солях необходимо знание их электронного энергетического спектра. Эта задача может быть решена с помощью экспериментального исследования их электронных свойств в достаточно сильном магнитном поле H , когда сверхпроводящее состояние разрушено, а циклотронная частота в магнитном поле много меньше частоты столкновений носителей заряда. При достаточно низких температурах термоэлектрическое поле, порожденное наличием градиента температуры, испытывает гигантские квантовые осцилляции, как функция $1/H$, что значительно облегчает решение обратной задачи восстановления электронного энергетического спектра.

Нами теоретически исследованы термоэлектрические явления в органических проводниках с многолистной поверхностью Ферми с различной топологической структурой, когда имеется несколько групп электронов, обладающих квазиодномерным и квазидвумерным энергетическим спектром. Показано, что исследование зависимости термоэлектрического поля от величины квантующего магнитного поля и температуры позволяет детально изучить энергетический спектр носителей заряда и различные механизмы релаксации в системе электронов проводимости.

1. W.A.Little, Phys.Rev. 134,A1416 (1964).

2. *Highly Conducting One –dimensional Solids*. J.T.Devreese, R.P.Ervard, and V.E.van Doren (eds.). Plenum Press, New York(1979).

3. *Высокоанизотропные молекулярные твердые тела*. В.А.Стародуб, И.В.Кривошей. Успехи химии, т.51, сс.764-792 (1982)

БРОУНОВСКИЕ МОТОРЫ В ВЯЗКОЙ СРЕДЕ

Розенбаум В. М.

Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины, Киев

В настоящее время активно исследуются неравновесные флуктуации в асимметричных средах, приводящие к однонаправленному движению броуновских частиц. Методологический и прикладной интерес к этим вопросам связан с изучением и конструированием так называемых броуновских моторов – «наномашин», эффективно преобразующих различные виды энергии в механическую, устройств для сегрегации наночастиц, молекулярных насосов и т.д. [1,2]. При описании броуновских моторов обычно пренебрегают инерционными эффектами, считая среду достаточно вязкой, и используют уравнение Смолуховского с флуктуирующей во времени и периодической по координате x силой $F(x,t)$. Полагая, что обратный коэффициент трения частицы ζ является малым параметром, можно получить общее выражение для средней скорости мотора $\langle v \rangle$ в виде степенного ряда по ζ^{-1} [3].

Особый интерес для конкретных приложений представляют дихотомные процессы (детерминистические или стохастические), характеризующиеся частотами переходов γ_{\pm} . В этом случае разложение $\langle v \rangle$ по ζ^{-1} позволяет обнаружить интересные кинематические закономерности для двух основных типов моторов, которые различаются ненулевым (rocking ratchet) или нулевым (flashing ratchet) значениями пространственной фурье-компоненты $F_q(t)$ с $q=0$. Например, для этих типов моторов $\langle v \rangle_r = \kappa \Phi_{r\kappa} + \varepsilon \Phi_{r\varepsilon}$ и $\langle v \rangle_f = \kappa (\Phi_{f\kappa} + \varepsilon \Phi_{f\varepsilon})$, где κ и $\varepsilon = \gamma_- - \gamma_+$ – коэффициенты пространственной и временной асимметрии функции $F(x,t)$ (обращающиеся в ноль при наличии соответствующей симметрии), а величины Φ – различные функции температуры, коэффициента трения ζ , частот γ_{\pm} и параметров $F(x,t)$. Отсюда следует, что конкуренция пространственной и временной асимметрии приводит к возникновению точек остановки мотора, вблизи которых направлением движения можно управлять посредством изменения температуры и других параметров модели.

1. P. Reimann, Phys. Rep. **361**, 57 (2002); P. Hänggi, F. Marchesoni, F. Nori, Ann. Phys. (Leipzig) **14**, 51 (2005).
2. V. M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, S. H. Lin, and T. Y. Tsong, J. Phys. Chem. B **108**, 15880 (2004).
3. В. М. Розенбаум, Письма в ЖЭТФ **88**, 391 (2008).

CHANGE OF PARADIGM OF STATISTICAL PHYSICS

Genri E. Norman

Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences

Dramatic changes of the conventional paradigm of statistical physics (cf. Landau&Lifshits course) emerged from the development of the molecular dynamics method (MMD) are considered. MMD becomes an important tool in condensed matter physics. It is based on the numerical solution of the Newtonian equations for systems of many particles, interacting with each other. Characteristics and properties of relaxation processes or equilibrium systems are extracted from the analysis of the particle trajectories calculated. MMD theory is developed: Lyapunov exponential trajectory divergence, dynamic memory time (predictability horizon), small but finite fluctuation of the total energy (break of the energy conservation law in MMD), stochastic and dynamic properties of MMD systems, irreversibility emergence. The correspondence between MMD and real systems is elucidated. Probabilistic nature of the classical statistical physics is demonstrated. Extensions of MMD to quantum systems are briefly considered. Based on the theory developed requirement standards are formulated for MMD modeling of both relaxation processes and equilibrium systems (particle number choice, initial and boundary conditions, diagnostics etc). All the key items are illustrated with the examples of classical and quantum MMD applications: phase equilibrium and stability borders, homogeneous nucleation at fracture/decay of metastable solids and liquids under stretching/overheating, dislocation emergency and motion at high strain rate plastic deformation, fluctuations in plasmas, dynamics of chemical and biochemical reactions.

ОДНОМЕРНЫЕ МОДЕЛИ ФЕРРИМАГНЕТИКОВ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ.

Черановский В.О., Езерская Е.В., Кравченко А.А.

Харьковский национальный университет имени В.Н.Каразина

За последние десятилетия появился ряд новых интересных материалов с одномерными магнитными подрешетками типа спиновых цепочек и лестниц. Необычные свойства таких магнетиков, например, большая чувствительность магнитных характеристик к вариациям химической структуры, представляют интерес не только для фундаментальной науки, но могут найти применение в современных нанотехнологиях.

В настоящей работе рассматриваются результаты теоретического моделирования магнитных характеристик двух решеточных моделей квазиодномерных ферримагнетиков на основе соединений переходных металлов. Первая модель – это так называемая диагональная спиновая лестница – ожерелье. Вторая модель - нанотрубка, полученная свертыванием в цилиндр декорированной прямоугольной решетки, в узлах которой расположены локализованные спины $s=1/2$. Обе модели имеют основное состояние со структурой типа спиновой волны и полным спином пропорциональным числу элементарных звеньев, а также щелевой характер возбуждений, приводящих к увеличению полного спина. Таким образом, можно ожидать появления плато в полевой зависимости намагниченности обеих моделей. Это заключение было подтверждено численными расчетами. Для первой модели изучалось влияние на ее энергетический спектр и магнитные характеристики появления вакансий в наполовину заполненной зоне соответствующего гамильтониана Хаббарда с сильным отталкиванием. На основе численных расчетов точного спектра конечных решеточных кластеров было показано, что при малом количестве вакансий могут появляться квантовые фазовые переходы первого рода по обменным интегралам взаимодействий соседних спинов.

Энергетический спектр и характер спинового упорядочения в основном состоянии второй модели изучался как численными (решение полной и частичной задач на собственные значения для матриц малых решеточных кластеров и метод группы перенормировки Вайта), так и аналитическими методами (теория возмущений и метод линеаризованных спиновых волн). На основе комбинации этих методов изучено влияние геометрических параметров элементарных ячеек спиновых нанотрубок на характеристики магнитного упорядочения в основном состоянии. Построены температурные и полевые зависимости магнитной восприимчивости и магнитного вклада в теплоемкость нанотрубки.

Работа выполнена при поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований (ДФФД, грант Ф25-4/013).

ФРАКТАЛЬНАЯ СТРУКТУРА ПЛОТНЫХ СИСТЕМ С АНИЗОТРОПНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Литинский Г. Б.

Факультет военной подготовки НТУ «ХПИ», Харьков

Для описания структуры и термодинамических функций плотных систем с анизотропным межмолекулярным взаимодействием (полярные, квадрупольные жидкости и твёрдые тела, магнитные системы) предложена модель заторможенного вращения молекул, в которой ориентационная динамика частиц моделируется конформационной динамикой бесконечной цепочки или сетки связанных анизотропными силами молекул. Такая фрактальная модель плотной системы приводит к простым аналитическим выражениям для термодинамических и диэлектрических функций модельных жидкостей и хорошо согласуется с данными машинных экспериментов.

В частности, для квазиодномерной системы – жидкости дипольных твёрдых сфер (ДТС) – в приближении взаимодействия ближайших соседей удельная свободная энергия имеет вид [1]:

$$\beta F / N = -\ln\left(\frac{\sinh(z)}{z}\right)$$

где $z = 2\beta\rho d^2$ – параметр диполь-дипольного взаимодействия, $\rho = N/V$ – плотность, d – дипольный момент ДТС, а $\beta = (kT)^{-1}$ – обратная температура.

Аналогичное аналитическое выражение получено и для квадрупольной жидкости, которая моделируется «статистической решёткой», связанных квадрупольными силами частиц [2].

Рассмотрено теоретическое обоснование и связь предлагаемого подхода с существующими фрактальными моделями аморфной среды. Обсуждаются границы применимости предлагаемой модели, а также природа геометрических переходов в рассматриваемых системах.

Для описания полярных жидкостей ниже перколяционного перехода получено обобщение модели ассоциативных равновесий, основанное на новом выражении для «ориентационной» константы ассоциации ДТС.

1. Литинский Г.Б. Журн. Структ. Химии. 2004. Т.45, №1. с. 86-93.
2. Литинский Г.Б. Журн. Структ. Химии. 2006. Т.47, №1. с. 45-51.

ПСИХОЛОГИЯ И ЭКОНОМИКА В ДИНАМИКЕ СОЦИУМА

В.М. Кошкин

Харьковский политехнический институт

Н.Кондратьев обнаружил, что экономические индексы во всех странах осциллируют с периодом около 50 лет (длинные волны в экономике). С.Маслов показал, что доминирующие стили в архитектуре осциллируют с тем же периодом. Позднее В.Петров, К.Мартиндэйл и В.Кошкин с сотрудниками (см.[1]) показали, что такие же осцилляции имеют место в музыкальном творчестве, в применении простонародных выражений в текстах, в мере интровертности в поэзии. Удастся описать такую динамику, учитывая обратную связь, которая определяется исключительно мерой заселенности в двухуровневой системе [1]. Маслов обнаружил, что «волны культуры» несколько впереди по фазе. Мы показали, что «волны интровертности-экстрровертности» в русской поэзии по крайней мере не запаздывают по отношению к волнам экономики. Проявления культуры - это психологическое состояния населения. Периоду застоя в экономике соответствует интроверсия, а экстравертность в поэзии – это времена изменений в социуме. Статистические исследования творчества характеризуют количественно психологическое состояние социума даже в далеком прошлом. Похоже, что не «бытие определяет сознание», а психология общества определяет экономику. Вряд ли это удивительно. Экономика инерционна, а идея, которая рождается в чьей-то голове – легка, почти невесома, не так ли? Именно идеи изменяли экономику. Мы не узнаем, кто изобрел колесо и рычаг, которые изменили мир. А вот персонифицировано – идеи, которые изменяли экономику: Карно и Уатт; Фарадей, Максвелл и Герц; Эйнштейн, Де Бройль, Резерфорд, Бор; Шеннон, Винер, Гейтс... Так что вначале было слово. Я не сумею дать определение понятию «прогресс». Будем полагать, что прогресс – это нарастание производства, которое определяется его уровнем, достигнутым к данному моменту. Если предположить, что кинетический коэффициент в соответствующем дифференциальном уравнении «прогресса» зависит от ментального состояния общества, изменяющегося (по тем или иным причинам) с периодом в 50 лет, легко увидеть, что волны экономики отстают от волн ментальности. Удастся (почти юмористически просто) проанализировать при каких условиях это влияние заметно, а когда исчезает. Это почти еще философия, эссеистика, правдоподобные высказывания. Но это уже и почти наука, допускающая количественную проверку. Любопытны количественные реминисценции на предмет того, когда по отношению к базовым и неустраняемым осцилляциям стоит вводить и стоит прекращать регулирующие действия государства в роковые минуты экономических бедствий [2]. Экономические потрясения в значительной мере определяются психологией общества. Политика – это искусство сочетать экономику социума и его психологию – к обоюдному успеху.

1. Koshkin V.M. Etudes on the Science of Humanities/ in: Emotion, Creativity, and Art, ed.by L.Dorfman, C.Martindale, V.Petrov et al, 1997, Perm, v.1, p.155-178.
2. Koshkin V.M. & Lyubchyk L.M. Periodicities in Humankind Dynamics: Influence of Perturbations: Theoretical Approach/ in: 20th Congress of International Association of Empirical Aesthetics, Chicago, 2008, Abstracts, p.31

ТРАНСФОРМАЦИЯ ЩЕЛЕВЫХ И ВНЕЩЕЛЕВЫХ СОЛИТОНОВ В МОДУЛИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

Ковалев А.С.,^{1,2} Йоханссон М.³

¹ Харьковский национальный университет им. В.Н.Каразина

² Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина

³ Университет г. Линчепинг, Швеция

Исследование динамики нелинейных сред привело к концепции *солитонов*, как важного ее элемента. При их изучении в некоторых случаях физическая трактовка не вполне ясна, и при этом важным является сопоставление тех или иных солитонов с соответствующими объектами в нелинейной динамике конечномерных систем [1]. Интересным типом солитонов (важным для физических приложений в оптоволоконных устройствах [2]) являются так называемые *щелевые* и *внещелевые* солитоны (GS, OGS), в системах с пространственно модулированными параметрами в (и около) щели спектра линейных волн, разделяющей две зоны спектра f и g . При частоте возникновения на одной из границ щели (f) GS близок к обычным солитонам огибающей зоны f . При изменении частоты в щели GS трансформируется в связанное состояние f - солитона с *темным* g -солитоном. На g -границе после стадии степенного солитона GS трансформируется в ненормируемый OGS, существующий наряду с возникающим обычным *темным* солитоном g -зоны. Для понимания GS \rightarrow OGS трансформации нормируемых решений (GS) в ненормируемые (OGS) рассмотрены аналоги этих возбуждений в системе конечной длины (в рамках нелинейного уравнения Шредингера) и в конечномерных дискретных системах типа «*магнитных молекул*» (в рамках дискретного НУШ) с $4n$ ($n=1 \div 4$) частицами с альтернированными параметрами. Показано, что на g -границе щели спектра *линейных* волн происходит резкая перестройка солитонных состояний, однако частоты OGS остаются внутри перенормированной амплитудой однородного фона *щели спектра нелинейных волн*.

Работа поддержана Шведской королевской академией наук и грантом РФФИ и НАН Украины № 8-2009

1. А.М.Косевич, А.С.Ковалев, *Введение в нелинейную физическую механику*, Киев, Наукова думка, 1989.

2. Yu.S.Kivshar, G.P.Agroval, *Optical solitons*, Academic Press, 2003

КИНЕМАТИКА И ДИНАМИКА ДВИЖЕНИЯ СОЛИТОНОВ В СИСТЕМАХ ФРЕНКЕЛЯ-КОНТОРОВОЙ

И. Д. Михейкин¹, В. П. Сакун².

¹Московский Государственный Университет Инженерной Экологии,
²Институт Химической Физики им. Н. Н. Семенова РАН

Для описания движения солитона в идеальных системах Френкеля-Конторовой при энергиях, существенно превышающих амплитуду пиннингового потенциала Пайерлса-Наварро (ППН), предложено динамическое уравнение Ланжевена, учитывающее случайную силу трения: $\ddot{y} + \alpha \dot{y} + \beta \sin 2\pi y = 0$, где y – безразмерная координата солитона в единицах длины периода потенциала субстрата; дифференцирование ведется по безразмерному времени τ в обратных характеристических частотах цепочки. Оказалось, что при вполне разумных допущениях сила трения пропорциональна скорости перемещения солитона вдоль цепочки (за координату солитона принимается значение первого момента формы солитона, определяемого по стандартной процедуре для дискретной цепочки). Описывается схема оценки коэффициента трения α через параметры конкретной системы Френкеля-Конторовой. С помощью специальной программы для РС проведены численные расчеты зависимостей координаты и скорости солитона от времени для различных начальных условий в широком интервале параметров системы. Анализ полученных в расчетах результатов показал, что затухание скорости движения солитона носит экспоненциальный характер с модуляцией этого процесса из-за влияния ППН и заканчивается «остановкой» солитона в одном из минимумов ППН. Это позволило предположить, что существует приблизительно линейная связь между скоростью солитона и его координатой. Такое предположение модифицирует исходное неинтегрируемое уравнение движения до полностью интегрируемого вида, которое имеет явное аналитическое решение для скорости солитона в зависимости от его координаты при любом виде ППН. Проведено сравнение аналитического решения с результатами численных расчетов, позволившее определить границы применимости сделанного приближения. Таким образом, проведение расчетов кинетических и термодинамических характеристик для систем Френкеля-Конторовой может быть существенно упрощено путем использования аналитических алгебраических выражений вместо громоздких численных расчетов для каждой конкретной ситуации.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ СТРУКТУР: ОТКРЫТЫЕ ВОЛНОВОДЫ И МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ ЛИНЗЫ

Гандель Ю. В.

Харьковский национальный университет имени В.Н.Каразина

*Очарован внезапною прелестью,
Ёлки, думаешь, где же это, братцы, я?
И стоишь так с отвисшею челюстью,
Но потом понимаешь: ДИФРАКЦИЯ.*
Игорь Иртеньев

Речь идёт о задачах теории дифракции монохроматических волн на системе, специальным образом расположенных, цилиндрических поверхностей, сечение которых плоскостью, перпендикулярной образующим, - открытые дуги эллипсов, а также на системах лент, лежащих в параллельных плоскостях. Изучаются вопросы анализа, синтеза и оптимизации указанных структур, а также возможности их использования в качестве лучевых волноводов и рефлекторов.

Рассматриваемые задачи в точной постановке – краевые задачи для уравнений Гельмгольца. Они сведены к системам граничных сингулярных интегральных уравнений, математические модели которых построены методом дискретных особенностей [1].

Проведен численный анализ открытых волноводов, результаты приведены в [2,3]. Металлическая линза состоит из большого числа лент и соответствующая краевая задача сводится к большому количеству сингулярных интегральных уравнений. Дискретизация приводит к большим системам линейных алгебраических уравнений. Создан алгоритм и программное обеспечение для эффективного решения этих систем. Проведен численный анализ различных конфигураций элементов, из которых формируются линзы, как для фокусировки волновых пучков, так и для создания квазиоптических рефлекторных антенн [2,4].

1. Гандель Ю.В. Метод дискретных особенностей в задачах электродинамики // *Вопросы кибернетики. ВК-124*. М.: Изд. АН СССР, 1986. – С. 166 – 183.

2. A.A.Nosich, Yu.V.Gandel, T.Magath, A.Altintas. Numerical analysis and synthesis 2-D quasioptical reflektors and beam waveguides...// *Journal of Optical Soc. of America A*. –2007.–Vol.24. №9.– pp.2831 – 2836.

3. A.A.Nosich, Yu.V.Gandel. Role of edge illumination in the mm-rang elliptic reflector beam waveguide performance // *Proceeding European Microwave Conference (EuMC-07)*. – Munich, 2007. – pp. 376 – 379.

4. A.A.Nosich, Yu.V.Gandel, A.Matsushima, R.Sauleau. Colimation and focusing of wave beans with metal – plate lens antennas...// *Pros. 2008 IEEE AP- S Int. Symp., San Diego, CA, 2008, session 237.10*

ОЛИМПИАДА «НАНОТЕХНОЛОГИИ – ПРОРЫВ В БУДУЩЕЕ!» - НОВЫЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ ПРОЕКТ МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Еремина Е.А., Еремин В.В., Гудилин Е.А., Третьяков Ю.Д.

Факультет наук о материалах и Химический факультет

МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

В сообщении обсуждаются концепция, задачи и результаты проведения Олимпиады по нанотехнологиям – нового образовательного проекта Московского университета. Цель Нано-олимпиады – популяризация знаний в области нанотехнологий, а также поиск и поощрение молодых талантов, желающих участвовать в развитии нанотехнологий в России и дружественных ей государствах.

В отличие от обычных предметных естественнонаучных олимпиад, главная задача этой Олимпиады – не выявление победителей, а знакомство участников с новой областью науки и технологии, их обучение и интеллектуальное развитие.

Нано-олимпиада – довольно масштабный проект, для участия в ней зарегистрировалось почти 6 тысяч человек в возрасте от 10 до 75 лет. Ее отличительная особенность – всесторонний охват всех важнейших разделов нанонауки и нанотехнологий и, как следствие, очень широкая целевая аудитория, основу которой составили школьники старших классов, студенты младших курсов и аспиранты.

Заочный тур Нано-олимпиады включал 5 предметных секций для школьников (химия, физика, математика, биология, для начинающих) и 7 секций для молодых ученых (нанохимия, нанофизика, функциональные наноматериалы, биология и наномедицина, конструкционные наноматериалы, наноинженерия). Отдельно стоит выделить творческий тур, в котором, среди прочего, рассматривались гуманитарные аспекты нанотехнологий, и был проведен конкурс учителей. Всего для олимпиады было разработано 120 авторских задач, 9 комплексных заданий творческого тура, курируемых крупными R&D или СМИ - компаниями, 20 задач очного тура для школьников, 8 экспериментальных заданий очного тура для молодых ученых.

Уникальность очного тура для молодых ученых состояла в том, что им предоставили возможность решать реальные научные задачи на современном оборудовании Центра коллективного пользования МГУ и защищать полученные результаты.

В заключение, обсуждаются научные и статистические результаты Нано-олимпиады, и рассматриваются направления ее развития.

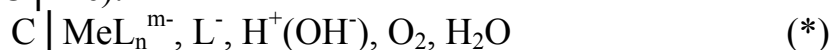
**АДСОРБЦИОННО-ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ФОРМИРОВАНИЕ
ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР
В СИСТЕМЕ «АКТИВИРОВАННЫЙ УГОЛЬ-БЛАГОРОДНЫЙ МЕТАЛЛ»**

*Тарасенко Ю.А.¹, Герасимюк И.П.², Гречко Л.Г.¹, Евтушенко Н.Е.²,
Клименко В.Е.¹, Куць В.С.¹, Лапко В.Ф.², Лысенко А.А.²*

¹Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины

²Институт сорбции и проблем эндоэкологии НАН Украины

Распределение активного компонента (металла) по пористой структуре носителя во многом определяет свойства нанесенных катализаторов. В настоящей работе представлены результаты изучения динамики формирования пространственных структур благородных металлов (БМ) на активных углях (АУ) в короткозамкнутых электрохимических системах типа «уголь-металл» ($C | Me$):



[C – активный уголь; MeL_n^{m-} – простые или комплексные ионы БМ (Ag^+ , $AuCl_4^-$, $PdCl_4^{2-}$, $PtCl_6^{2-}$ и др.); L^- -анионы Cl^- , SO_4^{2-} , NO_3^- и др; $H^+(OH^-)$ – кислая или щелочная среда; O_2 – растворенный в электролите кислород].

Особенности поведения систем (*) и их преимущества заключаются в реализации восстановительной сорбции (ВС) – самопроизвольного электрохимического восстановления ионов БМ непосредственно в ходе их сорбции из растворов при комнатной температуре вплоть до образования металлической фазы на развитой внешней и внутренней поверхности АУ. Наибольший интерес при этом представляет возможность управления распределением металла по глубине угольных гранул.

В качестве матриц (носителей катализаторов) использованы синтетические АУ сферической грануляции марки СКС с развитой пористой структурой и ярко выраженными восстановительными свойствами.

Рассмотрение стационарных состояний и моделирование процесса ВС в системах (*) проводили в рамках термодинамики необратимых процессов (критерий эволюции И.Пригожина) : показана возможность реализации в них различных стационарных состояний.

Расчет распределения поляризации по сечению сферических гранулах АУ (электродинамическая задача) выполнялся с учетом структурно-сорбционных характеристик активных углей, ионного сопротивления электролита и электронного сопротивления угольной матрицы. Получены профили поляризации и распределения потенциала по глубине сферических гранул АУ.

Модельное рассмотрение сопровождалось экспериментальным исследованием процессов формирования потенциала внешней поверхности гранул АУ и профиля распределения потенциала по их глубине. Выявлено, что даже при стационарном значении потенциала поверхности угля внутри гранул АУ он продолжительное время сохраняет низкие отрицательные значения, и, следовательно, и способность к восстановлению внутри них ионов БМ.

Кинетика сорбции ионов БМ на АУ изучалась методом отдельных навесок из ограниченного объема растворов при 25°C. Анализ данных свидетельствует, что (при выбранных условиях эксперимента) в начальные моменты времени (при осаждении пленок БМ на поверхности гранул АУ) процесс ВС происходит во внешнедиффузионной области, а при формировании внутренних пространственных структур «уголь-металл» реализуется внутридиффузионный режим.

Концентрационное распределение БМ по глубине гранул АУ изучалось методом электронной микроскопии (JSM-35, Japan, режим «COMPO»). Рассмотрение получаемых распределений металла выявляет такую последовательность стадий:

- вначале фронт «адсорбционно-восстановительной» волны металла распространяется с наружной пленки внутрь гранулы АУ;
- затем достигается практически равномерное распределение металла по всему объему гранулы;
- в дальнейшем происходит падение концентрации металла от периферии гранулы и нарастание ее к центру;
- в конце концов весь металл концентрируется в центральной области гранулы АУ.

Итак, условия ведения процесса ВС позволяют задавать распределение БМ по глубине гранул АУ от «корочковых» образований (через равномерное заполнение) до структур «желткового» типа. Описанный способ формирования С | Ме –систем может быть использован не только для приготовления катализаторов, но и для создания электродов кипящего слоя и металл-углеродных композиций с высокой объемной и поверхностной проводимостью.

ИНТЕРКАЛЯЦИОННАЯ ХИМИЯ ДИСУЛЬФИДА МОЛИБДЕНА

Ю.Н. Новиков

Учреждение Российской академии наук

Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова

Рассмотрены подходы к получению гибридных органо-неорганических нанокристаллических производных полупроводникового 2H-MoS₂. Подробно рассмотрен метод монослоевого диспергирования дисульфида молибдена, приводящий к дисперсиям отрицательно заряженных слоев MoS₂, взаимодействие которых с органическими металлокомплексными и неорганическими катионами приводит к образованию интеркаляционных соединений. Приведены аргументы, подтверждающие наличие отрицательного заряда на слоях дисульфида молибдена как в монослоевых дисперсиях, так и в конечных интеркаляционных соединениях. Представлены типы интеркаляционных соединений дисульфида молибдена (соединения с катионами: аммония, гетероциклов, красителей, координационных и комплексных соединений металлов дигидродоксидов металлов, металлов) Определены условия их образования и факторы, влияющие на состав образующихся производных и структуру внедренного слоя.

Рассмотрен и другой подход к синтезу интеркаляционных соединений дисульфида молибдена, заключающийся в предварительном синтезе активированного нанокристаллического дисульфида молибдена и последующей реакции его с нейтральными аминами и органическими катионами. Показана возможность получения нанокомпозитных материалов на основе дисульфида молибдена и фотоактивных полимеров. Проведено сопоставление данного метода с методом монослоевого диспергирования.

Представлены результаты по использованию активированного нанокристаллического дисульфида молибдена для получения пленок MoS₂ в мягких условиях. Приведены структурные и оптические свойства этих пленок. Рассмотрено влияние нанокристаллического дисульфида молибдена на фоточувствительность полимерсодержащего двухслойного композитного материала.

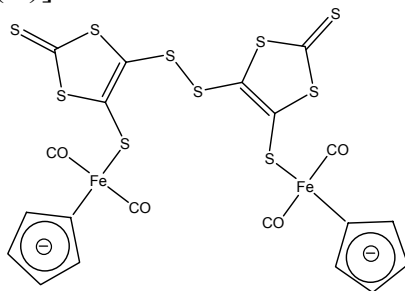
КВАЗИВЫРОЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В СИСТЕМАХ НИЗКОЙ СИММЕТРИИ

Стародуб В. А.

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

В полиядерных комплексах, точечная группа симметрии которых не содержит неприводимых представлений (НП) размерности выше 1, формально существует n -кратное вырождение электронных состояний (n – число ЦА). Такое вырождение несовместимо с симметрией системы и должно сниматься (по аналогии с давидовским расщеплением в кристаллах). В мало сопряженных системах такое расщепление может быть очень мало. Однако, чувствительность метода ЯГРС (эффект Мёссбауэра) может быть вполне достаточной для обнаружения такого расщепления.

Для исследования подобного рода эффектов нами использован биядерный комплекс бис[(1,3-дитиол-2-тион-4,5-дитиолато)-ди-(карбонил)-циклопентадиенилжелеза(II)]:



Точечная группа симметрии этого комплекса – C_2 – не допускает двукратного вырождения, и поэтому в спектре ЯГРС действительно наблюдается расщепление линий. Атомы железа связаны цепочкой из восьми атомов, поэтому взаимодействие между ними должно быть малым. Кроме того, для Fe(II) в сильном поле электроны должны быть спарены. Однако, измерения температурной зависимости магнитной восприимчивости показывает, что комплекс парамагнитен и его магнитный момент соответствует двум неспаренным электронам.

Для выяснения причин такого необычного поведения были проведены квантово-химические расчёты методом DFT в базисе B3LYP/6-31(dp)G. Результаты расчётов согласуются с экспериментом и позволяют сделать вывод, что расщепление квазивырожденных уровней в низкосимметричных системах должно проявляться независимо от степени обменного взаимодействия.

ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СОЕДИНЕНИЯХ $\text{CuSO}_4(en)\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{CuSO}_4(en)\cdot 2\text{D}_2\text{O}$: РОЛЬ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ

А.Андерс, Д.Зиолковский

Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина

О.Кравчина, А.Каплиенко, Э.Николова

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАНУ

Возможность квантово-химических расчетов обменных взаимодействий для металло-органических систем с водородной связью является проблематичной. Чаще всего значения обменных параметров для этих соединений составляют $\sim 0.1 \div 1 \text{ см}^{-1}$, и учитывая сложность органических фрагментов молекул рассматриваемых систем, необходимая точность расчета при разумных затратах машинного времени становится практически недостижимой. Поэтому в этих случаях приходится прибегать к экспериментальному доказательству участия водородных связей в реализации обменных взаимодействий.

Нами исследовано влияние замещения водорода дейтерием в молекулах кристаллизационной воды, содержащихся в структуре металло-органических соединений $\text{CuSO}_4(en)\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{CuSO}_4(en)\cdot 2\text{D}_2\text{O}$, на величину обменного взаимодействия между ионами меди. Данные рентгено-структурного анализа и угловой анизотропии эффективного g-фактора ионов Cu^{2+} обоих соединений свидетельствуют о минимальных искажениях исходной кристаллической структуры, вызванных дейтерированием. Основу кристаллической структуры составляют цепочки октаэдров, являющихся локальным окружением ионов меди. Связь октаэдров в цепочках осуществляется через вершинные ионы кислорода, принадлежащие группам $[\text{SO}_4]^{2-}$. Межцепочечное взаимодействие должно происходить с участием водородных связей $\text{O-H}\dots\text{O}$ или $\text{O-D}\dots\text{O}$ соответственно. Основное орбитальное состояние ионов Cu^{2+} в виде суперпозиции $d_{x^2-y^2}$ и d_{z^2} орбиталей с максимумами электронной плотности в направлениях вершин октаэдров способствует реализации именно такой схемы обменных взаимодействий.

Сравнительный анализ ширины линии ЭПР обоих соединений, которая является обменно-суженной и описывается теорией Андерсона-Вейсса [1], демонстрирует 15%-ное уменьшение обменного параметра в дейтерированном образце по сравнению с исходным. Это качественно и количественно подтверждает участие водородных связей в реализации обменного взаимодействия в исследуемых системах.

1. P.W.Anderson, P.R.Weiss, *Rev. Modern Phys.*, **25**, 269 (1953)

VIBRATIONS OF COMPLEX CRYSTAL LATTICES: MODEL THERMODYNAMICS FOR $\text{La}_{2/3}\text{Ba}_{1/3}\text{MnO}_3$

Beznosov A.B.¹, Ritter C.², Fertman E.L.¹, Kajnakova M.³, Feher A.³

¹B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov

²Institut Laue-Langevin, Grenoble

³Centre of Low Temperature Physics of P.J. Šafárik University and Institute of Experimental Physics of the Slovak Academy of Sciences, Košice

The crystal lattice dynamics of complex oxides of the transition elements, such as e.g. manganites, exhibiting the colossal magnetoresistive effect, or cuprates, possessing of the high temperature superconductivity, substantially determines their thermodynamics in a wide temperature range. The contribution into thermodynamic functions from an ideal crystal lattice with independent on temperature characteristics, which allows refining effects of the temperature phase transitions from experimental temperature dependences of thermodynamic characteristics of these compounds, is of special interest. We have developed an effective model of such vibrations for the perovskite-like manganite $\text{La}_{2/3}\text{Ba}_{1/3}\text{MnO}_3$. The lattice vibrations spectrum in the model consists of the acoustical and optical phonon bands. Parameters of the model, the Debye and the Einstein temperatures $\theta_D=230$ K and $\theta_E=500$ K, respectively, are determined from the temperature dependences of the Debye-Waller factors for the Mn, La/Ba and O ions, obtained in the experiments on the elastic neutron scattering (diffractometer D2B, ILL, Grenoble) [1]. The weight, which every of these bands possesses of in the thermodynamic functions of the lattice (e. g. in the heat capacity), is determined by the relative number of the degrees of freedom per corresponding vibration type, and amounts 0.2 and 0.8 for the acoustical and optical bands, respectively. Comparison of the temperature dependences of the heat capacity and entropy, computed for the model and measured experimentally, have shown a good agreement of the difference of the values considered with an expected contribution from the magnetic subsystem and diffusionless first order structural phase transition in the compound [2].

The work was partly supported by grant from the National Academy of Sciences of Ukraine no. 3-026/2004 (contract no. 1/07-N), and by the Slovak Research and Development Agency (No. APVV-0006-07), the Slovak Grant Agency VEGA (No.1/0159/09).

1. A.B. Beznosov, E.L. Fertman, V.A. Desnenko, A. Feher M. Kajnakova, C. Ritter, D.D. Khalyavin, *Fiz. Nizk. Temp.*, **35**: №6, (2009).
2. A.B. Beznosov, V.A. Desnenko, E.L. Fertman, C. Ritter, D.D. Khalyavin, *Phys. Rev.*, B **68**: 054109 (2003).

СКАНИРУЮЩАЯ ТУННЕЛЬНАЯ МИКРОСКОПИЯ И СПЕКТРОСКОПИЯ НАНООКСИДОВ

Далидчик Ф.И., Шуб Б.Р.

Институт химической физики им. Н.Н.Семёнова РАН, Москва

Формулируется концепция «нанолаборатории», предусматривающая разработку новых экспериментальных методов, использующих сканирующий туннельный микроскоп, которые позволяют на уровне единичных нанообъектов решать задачи синтеза и модификации наночастиц, анализа их электронного и атомного строения, установления механизмов фундаментальных гетерогенных процессов. Описаны новые варианты туннельной спектроскопии – «обращённая» схема эксперимента, кинетическая туннельная спектроскопия и резонансная туннельная спектроскопия в сильном поле. Приведены результаты восстановления новыми методами характеристик элементарных актов диссоциативной адсорбции кислорода на алюминии; параметров единичных кислородных вакансий оксидов алюминия, вольфрама и платины; механизмов перезарядки электронных ловушек оксидов металлов и соответствующих им скоростей переходов. Обозначена область возможных применений разрабатываемых методов, охватывающая катализ, фотокатализ, наноэлектронику, люминесцентную зондовую диагностику клеток и синтез новых энергонасыщенных материалов.

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ АДсорбции НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДОВ

Лобанов В.В.

Институт химии поверхности им. А.А.Чуйко
Национальной академии наук Украины

Разработана численная процедура расчета распределения электростатического потенциала (ρ) у поверхности оксидов, в которых координационные числа оксидообразующего элемента и кислорода совпадают с их валентностями. Важность учета электростатического поля твердой подложки продемонстрирована на примере поверхности диоксида кремния. Проведенное сопоставление распределений ρ у поверхностей гидроксированного, хлорированного, амминированного и гидрированного SiO_2 со структурой грани (111) β -кристобалита обнаружило их отчетливую зависимость от природы поверхностных функциональных групп, что позволило наглядно описать их сравнительную активность в процессах адсорбции полярных соединений. Из распределения потенциала для трех моделей гидратного покрова поверхности кремнезема получена важная информация о начальных этапах ее гидратации и особенностях сорбции катионов без выполнения трудоемких вычислений поверхности потенциальной энергии. В частности показано, что начальные стадии сорбции катионов поверхностью кремнезема протекают при участии молекул сорбированной воды, а не структурных силанольных групп.

Использование представлений о роли электростатического потенциала в химии поверхности оксидов позволило смоделировать изменение свойств поверхности при введении в их структуру различных примесных ионов. Важно, что на этой основе возможен наглядный анализ химических последствий любого изменения состава и структуры поверхности и объемной фазы оксидов и их композиций, что позволяет признать расчеты с явным учетом электростатического поля эффективным средством вычислительного эксперимента и теоретического дизайна твердотельных систем с заданными свойствами.

Привлечение представлений о приповерхностном электростатическом поле позволило более корректно описать реакции на поверхности в рамках деформационной модели активационных барьеров и выяснить факторы, определяющие степень искажения пространственного строения молекул модификатора у поверхности адсорбента. Преимущество этого подхода в простоте рассмотрения, в отказе от стандартного супермолекулярного описания. Также появляется возможность сравнения реакционной способности молекул в реакциях электрофильного замещения протона не только в ряду родственных соединений, но и соединений, содержащих различные функциональные группы.

ОСОБЛИВОСТІ ВНУТРІМОЛЕКУЛЯРНИХ КОЛИВАНЬ МОЛЕКУЛИ КИСНЮ АДСОРБОВАНОЇ НА ПОВЕРХНІ КРИСТАЛІЧНОГО КРЕМНІЮ

Теребінська М.І, Лобанов В.В.
Інститут хімії поверхні НАН України

Квантово-хімічні методи дозволяють дати всебічне трактування особливостей спектрів втрат енергії електронів, з яких можливо зробити однозначні висновки, щодо симетрії і геометричного розташування молекул на поверхні та наявності структурних груп на ній. Тому сучасні спектроскопічні дослідження повинні включати поряд з повним і детальним аналізом експериментальних даних також теоретичний аналіз нормальних коливань досліджуваних систем і наближений розрахунок їх частот та інтенсивностей.

В даному повідомленні наведені результати розрахунків коливальних спектрів адсорбційних комплексів молекули кисню і продуктів їх подальшого перетворення на грані (111) поверхні кристалічного кремнію. Розрахунки виконувались методом функціоналу густини з базисним набором 6-31G** у кластерному наближенні з використанням гібридного обмінного трьохпараметричного функціоналу Бекке (B3) і кореляційного функціонала Ли-Янга-Парра (LYP), в якому обмінна енергія розраховувалась з залученням точного результату, отриманого методом Хартрі-Фока.

Так, зокрема показано, що частота валентних коливань зв'язку O–O молекулярно адсорбованого кисню складає 756 см^{-1} , в той час як в ізолюваній молекулі O_2 вона дорівнює 1580 см^{-1} . Такий зсув частоти пояснюється зростанням довжини розглядуваного зв'язку в адсорбційному комплексі. Для структури з хемосорбованими атомами кисню в top-положеннях відносно поверхневих атомів силіцію частота валентних $\equiv\text{Si}-\text{O}$ коливань складає 936 см^{-1} в порівнянні з аналогічною частотою в молекулі $\text{Si}-\text{O}$ (853 см^{-1}). Це свідчить про значну взаємодію атома кисню з ґраткою кремнію, що є передумовою вбудування атома кисню в зв'язок $\text{Si}-\text{Si}$ і подальшого утворення оксидного шару на поверхні кристалу.

Досить характерною є різниця між симетричними (916 см^{-1}) та антисиметричними (1044 см^{-1}) деформаційними O–Si–O коливаннями для структури, в якій один атом O вбудований у зв'язок $\text{Si}-\text{Si}$, а другий займає top-положення відносно поверхневого атома кремнію. Вона сягає для комплексу ins-top 128 см^{-1} , що значно перевищує типову різницю для ізолюваних кремній-та кисеньовмісних молекул.

За допомогою теоретично одержаних результатів зроблені висновки про можливу будову адсорбційних комплексів молекулярного кисню на поверхні кристалічного кремнію, що поряд експериментальними даними відносно спектрів характеристичних втрат енергії електронів, дозволило деталізувати їх реальну структуру.

ТОПОЛОГИЯ В ФИЗИКЕ, ХИМИИ И БИОЛОГИИ

Maxim Frank-Kamenetskii

Center of Advanced Biotechnology and Department of Biomedical Engineering,
Boston University

Автор познакомился с И. В. Кривошеем в 1971 г., и завязавшаяся многолетняя дружба оказала на него (автора) большое влияние. Кривошей был необыкновенно разносторонним ученым, но с наибольшим энтузиазмом он работал на стыке двух областей: химии и математики. В области математики он в особенности был увлечен топологией, и он развил целый ряд топологических подходов в химии. Еще в 1968 г. Кривошей опубликовал статью на тему узлов в химии (1). В том же году Эдвардс опубликовал свою теорию узлов в полимерах (2), вызвавшую большой интерес. Интерес автора к проблеме возник в ходе изучения работы Эдвардса, когда удалось показать, что использовавшееся им выражение для узла вообще не являлся топологическим инвариантом. Убедившись, что аналитический подход к проблеме, типа развивавшегося Эдвардсом, невозможен, автор с сотрудниками впервые применили компьютерный подход, основанный на строгих результатах математической теории узлов (3). Так возникло чрезвычайно плодотворное направление в теории полимеров и биополимеров (см. обзоры (4,5)).

Особенно большое значение топология играет в области ДНК (см. книгу (6)). Различают два уровня топологии в кольцевых ДНК: узлы, которые образует двойная спираль как целое, и зацепления, образуемые двумя комплементарными цепями друг с другом. Топология играет очень важную роль в функционировании ДНК в клетке. Были обнаружены специальные ферменты, топоизомеразы, функция которых состоит в переводе ДНК из одной топологической формы в другую. Недавно было показано, что некоторые топоизомеразы работают как топологические моторы, которые, используя энергию АТФ, превращают заузленные молекулы ДНК в незаузленные (тривиальные узлы). Топология приводит к важнейшему феномену в области кольцевых ДНК, сверхспирализации. Экспериментальные и теоретические исследования показали, что сверхспирализация существенно меняет физическое состояние ДНК и приводит к локальному образованию в ДНК неканонических структур, отличных от классической двойной спирали, таких как крестообразные структуры, Z-форма и H-форма (см. (6)).

1. И.В.Кривошей Ж. Структ. Химии **9**, 285, 1968.
2. S.F.Edwards J.Phys. Ser. A **1**, 15, 1968.
3. А.В.Вологодский, А.В.Лукашин, М.Д.Франк-Каменецкий, В.В.Аншелевич ЖЭТФ **66**, 2153, 1974.
4. М.Д.Франк-Каменецкий, А.В.Вологодский УФН **134**, 641, 1981.
5. E.Orlandini, S.G.Whittington Rev. Mod. Phys. **79**, 611, 2007.
6. М.Д.Франк-Каменецкий «Век ДНК» КДУ, Москва, 2004

РЕГУЛЯРНЫЕ И СЛУЧАЙНЫЕ РАЗБИЕНИЯ ДИРИХЛЕ В ОПИСАНИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ

Коробов А. И.

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

В двумерном случае разбиение Дирихле для дискретной системы центров – это разбиение плоскости на непересекающиеся области, каждая из которых является геометрическим местом точек, расположенных ближе к "своему" центру действия, чем ко всем остальным; равноудаленные точки образуют границы областей. Разбиения могут быть регулярными (правильными), если строятся для правильной системы центров, и случайными, если строятся для центров, расположенных случайным образом. В последнем случае допускается возникновение новых центров со временем.

При описании химических реакций на кристаллических поверхностях интерес к такой математической конструкции связан с несколькими задачами. Прежде всего, это возникновение пространственно-временных структур на наномасштабах, не укладывающихся в рамки традиционного формализма "реакция+диффузия". К этому тесно примыкает описание каталитических реакций на наноструктурированных поверхностях. Родственная задача немного иного плана – описание химических реакций самих кристаллов, когда образующиеся фигуры локализации соответствуют кристаллической структуре реагента. При решении этих и подобных задач кристаллическая структура поверхности должна входить в модель, и не всегда выигрышно вводить ее в модель в терминах кристаллической решетки. Альтернативой являются планигоны, которые с математической точки зрения представляют собой регулярные разбиения Дирихле. Описание кристаллической поверхности в терминах планигонов детальнее за счет того, что наряду с симметрией принимается во внимание комбинаторо-топологическая структура.

При моделировании кинетики реакций методом Монте Карло или клеточных автоматов с использованием разбиений на планигоны, результаты в ряде случаев могут быть визуализированы и проанализированы в терминах случайных мозаик, которые представляют собой случайные разбиения Дирихле. В рассматриваемом случае их отличительные особенности – дискретность и неевклидова метрика. Обсуждаются свойства таких дискретных случайных мозаик, в частности, особенности границ. Распределение случайных областей по площади практически нечувствительно к изменению метрики, но кинетические свойства мозаик и отношение соседства изменяются при изменении метрики.

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ПЕРЕХОД В KN_2PO_4 (KDP) И ЕГО БАРИЧЕСКАЯ ЗАВИСИМОСТЬ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Долин С. П., Михайлова Т. Ю., Бреславская Н.Н., Левин А. А.

ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

Для KN_2PO_4 [1] как представителя семейства материалов MN_2AO_4 ($\text{A} = \text{P}, \text{As}$) на основе неэмпирических расчетов параметров псевдоспинового гамильтониана

$$H = -\Omega \sum_i \sigma_i^x - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z.$$

(σ_i^x и σ_i^z - матрицы Паули) изучена зависимость низкотемпературного сегнетоэлектрического (СЭ) поведения кристалла от геометрии водородных связей О-Н...О и динамики протонов. Параметры гамильтониана Ω - интеграл туннелирования, описывающий квантовое движение протона вдоль Н-связи и J_{ij} - параметры эффективного парного взаимодействия протонов в модели Изинга рассчитаны на ряде кластерных моделей. Последние включают битетраэдрические кластеры состава $\text{X}_3\text{PO}-\text{H}\dots\text{OPX}_3$ при расчете Ω и пентатетраэдрические кластеры состава $\text{P}(\text{O}-\text{H}\dots\text{OPX}_3)_4$ при вычислении J_{ij} . Для геометрии кластеров использовались нейтронографические данные [2] по структуре KDP (293К). Уже в рамках приближения молекулярного поля [3] можно сделать вывод о наличии у KDP низкотемпературного СЭ перехода, что согласуется с экспериментом [1]. К такому же выводу приводит более совершенный метод кластеров Бете [3], в котором частично учтена протон-протонная корреляция. Данные [2] по структуре KDP (293К, 16,5кбар) позволяют повторить расчеты параметров Ω и J_{ij} для случая связей О-Н...О, сжатых этим давлением. Метод Бете указывает тогда на исчезновение у KDP СЭ перехода из-за его подавления квантовым движением протонов, что также соответствует опытным данным [4].

Работа поддержана РФФИ, проект 08-03-00195.

[1]. Lines M.E., Glass A.M., Principles and Application of Ferroelectrics and Related Materials, Oxford, Clarendon Press, 1977

[2]. Nelmes R.J., Tun Z., Kuhs W.F., Ferroelectrics, 1987, 71, 125.

[3]. В.Г. Вакс, Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков, М., Наука, 1973

[4]. G. Samara, Phys.Rev.Lett., 1971, 27, 103

ДИНАМИКА ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ В ПОТЕНЦИАЛЕ БЭЙНА

Михайлова Т. Ю.,¹ Пупышев В.И.²

¹ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

²МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Посредством численного решения временного уравнения Шредингера (с помощью различных представлений оператора эволюции и способов учета краевого эффекта на правой границе сетки численного интегрирования) исследована динамика поведения волновых пакетов на полуоси в модельном одномерном потенциале, характеризующемся наличием резонансного уровня - хорошо известном в литературе [1,2] потенциале Бэйна:

$$V(x) = Ax^2 \cdot \exp(-x).$$

Рассмотрена зависимость вероятности выживания начального квантового состояния от близости его средней энергии к резонансной энергии потенциала. Проведено сравнение особенностей эволюции на малых временах для начальных волновых пакетов разной формы.

Работа поддержана РФФИ, проект 08-03-00195 и 07-03-01021.

[1] U.V. Riss, H.-D. Meyer, J.Phys.B., 1993, 26, p.4503

[2] T. Yu. Mikhailova, V. I. Pupyshev, Opt. Spectr, 1999, 87, p.29

ИНДЕКСНЫЙ ПОДХОД В ПРОБЛЕМЕ ВЫБОРА АКТИВНОГО ПРОСТРАНСТВА ДЛЯ МУЛЬТИРЕФЕРЕНСНЫХ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ

Лях Д. И., Иванов В. В.

Харьковский Национальный университет имени В. Н. Каразина,

Проблематика квантовой химии во многих случаях связана с необходимостью описания так называемых квазивырожденных электронных состояний. Эти состояния возникают при описании разрыва и образования химических связей, в переходных комплексах, в электронно-возбужденных состояниях и т. д. Характерная особенность таких состояний – наличие набора детерминантов Слейтера, дающих значительные вклады в точную волновую функцию. Для адекватного описания квазивырождения используются мультиреференсные теории связанных кластеров (multireference coupled cluster, MRCC). В этих теориях важнейшие (референсные) детерминанты строятся в результате распределения электронов среди так называемых “активных орбиталей”. Традиционно, активные орбитали выбирались на основе химической интуиции. Однако, в общем случае, их выбор представляет собой определенную проблему. В связи с этим нами разработан ряд индексов, позволяющих выделить группу активных МО для проведения MRCC расчета. Основная идея нашего подхода – использование *немультиреференсного* источника информации о волновой функции исследуемого состояния. В качестве такового может служить стандартная теория связанных кластеров или ограниченный метод конфигурационного взаимодействия (CI). Один из реализованных подходов связан с вычислением веса возбужденных конфигураций, которые вовлекают данную МО в разложение CI:

$$\gamma_p = \sum_{\{k\} \supset p} |C_k|^2 \quad (1)$$

В этом выражении C_k – конфигурационный коэффициент при детерминанте k , p – орбиталь, с которой (или на которую) происходит переход при формировании “возбужденного” детерминанта. Очевидно, что те орбитали, для которых γ_p велико, и являются активными. Если же среди всего набора орбиталей не удастся выделить поднабор с относительно большими значениями γ_p , то задача не требует применения MRCC теории. Предложенный подход успешно протестирован на серии модельных задач с квазивырождением (разрыв химической связи, электронно-возбужденные состояния) в молекулах BH, FH, F₂, H₂O, N₂, C₂, H₈.

ПОЛУЭМПИРИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ. ПРОГНОЗ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СОПРЯЖЕННЫХ МОЛЕКУЛ

Клименко Т. А., Иванов В. В.

Харьковский Национальный университет имени В. Н. Каразина

Разработка новых математических моделей в химии связана, в частности, с необходимостью квантовохимического описания многоэлектронных систем. На пример, для оценки гиперполяризуемостей многоатомных систем, вплоть до нанотрубок, больших фрагментов полимеров, супрамолекулярных структур. Для реализация приближенной схемы, ранее нами была разработана соответствующая компьютерная программа – π СС, позволяющая проводить π -электронные (гамильтониан Паризера-Парра-Попла) расчеты методом связанных кластеров (Coupled Cluster, CC) включающим однократные и двукратные возбуждения (CC singles and doubles, CCSD). Эффективный метод CC превосходно зарекомендовал себя в неэмпирической квантовой химии, однако возможности его использования в рамках полуэмпирических подходов изучены мало. Особенно интересны сравнения результатов метода CCSD с данными MP2, поскольку последний является наиболее распространенным и простым методом учета электронной корреляции, не требующим значительных затрат вычислительной техники.

Нами проведен ряд π -полуэмпирических CC расчетов различных сопряженных углеводородов включая полиены, циклополиены, полиметины, конденсированные углеводороды. Рассчитанные величины гиперполяризуемостей, полученные в рамках CCSD, практически совпадают с экспериментальными данными. Так, средняя величина $\langle \gamma \rangle$ для полиена $C_{18}H_{20}$ в методе CCSD составляет $10,5 \cdot 10^5$ а.е., тогда как экспериментальное значение $\langle \gamma \rangle_{\text{exp}} = 11,3 \cdot 10^5$ а.е. Важно отметить, что RHF и MP2 существенно завышают $\langle \gamma \rangle$ и в целом описывают неверную зависимость $\langle \gamma \rangle$ от числа углеродных атомов. Интересен также вопрос об эффективности расчетных методов в описании молекулярных систем состоящих из несвязанных (или слабосвязанных) π -подсистем (*молекулярные кристаллы, наносистемы*). Для моделирования подобных структур, мы провели расчет (гипер)поляризуемостей ряда модельных систем. При описании систем с тройной связью установлена значительная эффективность метода CCSD без орбитальной релаксации. В целом показано, что полуэмпирический подход в теории связанных кластеров позволяет адекватно (с высокой точностью) описать как отдельные молекулы, так и комплексы.

A QUANTUM CHEMICAL STUDY ON HYDROGEN BONDING AND PROTON MIGRATION IN INDIUM(III) HYDROXIDE NANOPARTICLES

Grebenyuk A.G.

A.A. Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences

High disperse solid oxides and hydroxides are well-known adsorbents and acid-base catalysts. Their surface properties are usually conditioned by a plenty of factors including Brønsted (protonic) and/or Lewis (aprotic) acid sites. As a rule, surface hydroxyl groups have mobile hydrogen atoms bearing enlarged positive electric charges. Such atoms usually take part of hydrogen bonding with solid frame oxygen atoms and can migrate along these hydrogen bonds at elevated temperatures. Nowadays these phenomena are widely examined by means of both experimental and theoretical methods.

Hydrogen bonding and proton migrations are especially typical for skeleton structures. This work is devoted to design and quantum chemical simulation of molecular models for indium(III) hydroxide. This substance forms cubic crystals with skutterudite-like spatial structure built of indium-oxygen octahedra and planar square cycles including four hydroxyl groups united by hydrogen bonds. The smallest molecular model of $\text{In}(\text{OH})_3$ was built of four $\text{In}_2\text{O}_2(\text{OH})_2$ groups and had a cyclic system of hydrogen bonds. An associate of 12 formula units formed two cubic cells with common face and 8 hydrogen bonds. Then, a real-size cluster was designed of 64 formula units (nanocrystals with diameter of 1 to 3 nm were recently prepared in experimental way). Despite a cubic shape terminated with 12 cyclic groups (every formed by 4 hydroxyls united with 4 hydrogen bonds), its point symmetry group can be only T (in case of hydrogen atom positions in the middle of oxygen-oxygen distances) or even S_2 (in case of regular distribution of localized O-H bonds). All the calculations were carried out by *ab initio* Hartree-Fock-Roothaan method with 3-21G** basis set and within semiempirical PM3 approximation by means of the GAMESS 6.4 program package designed by Alex Granovsky from Moscow State University (Russia).

When optimized within *ab initio* method (unfortunately PM3 calculations failed in predicting hydrogen-bound states) and C_{4h} point symmetry group, the spatial structure of $[\text{In}_2\text{O}_2(\text{OH})_2]_4$ includes two covalent fragments united by 8 [In-OH-In] bridges and 4 hydrogen bonds. Relative transition state were preliminarily localized within D_{4h} point symmetry group, following saddle point finding resulted in the same structure. Nevertheless molecular models of 12 and 64 formula units were successfully treated by PM3 method giving both local minima and transition states. The values of activation energy for proton migrations were then estimated.

ВЛАСТИВОСТІ ПОДВІЙНОГО ЗВ'ЯЗКУ МОДИФІКОВАНОГО АКТИВОВАНОГО ВУГІЛЛЯ

*Яцимирський В.К., Биков Д.О., Дацюк А.М., Задерко О.М.,
Лобанов В.В., Діюк В.Є.*

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Інститут хімії поверхні імені О.О. Чуйка НАН України

Вуглецеві матеріали (ВМ) та активоване вугілля (АВ) завдяки можливості контролювання текстурних та хімічних властивостей поверхні знаходять широке застосування як сорбенти, носії та каталізatori. Будову АВ можна уявити як конденсовану поліциклічну систему, яка містить перспективні щодо хімічного модифікування крайові подвійні зв'язки. Умовою для створення ВМ із заданими властивостями є одержання даних про електронну і просторову будову активних центрів та їх можливих перетворень. Це можна одержати квантовохімічним моделюванням.

В даній роботі активні центри АВ було смодельовано радіально симетричними поліциклічними системами, що склалися з 7, 19 та 37 ядер бензену. Поведінка цих систем була розглянута в реакціях бромовання та окиснення. Пошук рівноважних конфігурацій здійснювали з використанням неемпіричної процедури самоузгодженого поля в базисі 3-21G. Точність оптимізації геометричних параметрів визначалась максимальним значенням 10^{-5} Хартрі/Бор похідних енергії за декартовими координатами; енергію розраховували з точністю $2,6 \cdot 10^{-2}$ кДж/моль (10^{-5} ат.од.). Застосовували пакет квантовохімічних програм GAMESS 6.4.

Показано, що при збільшенні кількості конденсованих бензенових кілець від 7 до 37 довжини крайових подвійних зв'язків зменшуються, а їхній порядок збільшується. Довжина крайового C=C зв'язку наближається до 0,134 нм, що відповідає довжині локалізованого подвійного зв'язку в алкенах і вказує на його високу хімічну активність в реакціях приєднання. На існування локалізованого подвійного зв'язку в обраних модельних сполуках не впливає їхня симетрія, дефекти структури та вакансії атомів карбону.

Встановлено, що зі збільшенням кількості конденсованих бензенових кілець термодинамічна стійкість Br-вмісних продуктів зростає, а продуктів відщеплення зменшується, що підтверджується результатами хімічного дослідження. Показано, що реакції заміщення при ароматичному ядрі є енергетично менш вигідними, ніж реакції приєднання до крайового подвійного зв'язку.

Встановлено, що подальше бромовання та окиснення пероксидом водню відбуваються легше для подвійного зв'язку, який знаходиться через один до того, що вже вступив в реакцію приєднання. Розраховано теплоти утворення продуктів взаємодії моделей АВ з бромом, пероксидом водню і нуклеофільними агентами.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ – СЕНСИБИЛИЗАТОРОВ ДЛЯ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ

Барышников Г.В., Минаев Б.Ф., Минаева В.А.

Черкасский национальный университет им. Богдана Хмельницкого

В рамках теории функционала плотности исследованы координационные соединения Ru(II) и Ir(II) с органическими (2,2'- бипиридин (bpy)) и неорганическими (–Cl и –CN) лигандами: $[\text{Ru}(\text{bpy})(\text{CN})_4]^{2-}$, $[\text{Ru}(\text{bpy})\text{Cl}_4]^{2-}$, $[\text{Ru}(\text{bpy})_2(\text{CN})_2]$, $[\text{Ir}(\text{bpy})_2(\text{CN})_2]$ и другие. Показано, что для данных соединений характерен π – π^* переход с переносом заряда по типу металл – лиганд (MLCT). Установлена природа перехода, согласно которой перенос заряда, в основном, осуществляется с высшей занятой молекулярной орбитали (рис.1. а) на низшую вакантную молекулярную орбиталь (рис.1. б).

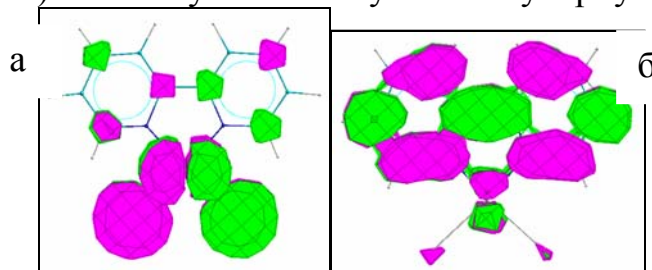


Рис. 1. Граничные молекулярные орбитали комплекса $[\text{Ru}(\text{bpy})\text{Cl}_4]^{2-}$

Структура комплексов, ИК и Раман-спектры рассчитаны методом DFT/B3LYP в базисе Lanl2DZ; расчет электронных спектров проведен в приближении случайных фаз. Изменение структуры комплекса при возбуждении в триплет определяется связывающим характером НВМО по отношению к С–С связи между кольцами.

Расчеты указывают на сильный сдвиг первой полосы поглощения в присутствии растворителя (сольватохромный эффект), что согласуется с экспериментом. [1]

Исследован вклад электрического и магнитного моментов перехода в оптическую активность исследуемых комплексов.

Результаты расчетов ИК и Раман-спектров полностью согласуются с экспериментальными данными [2], что свидетельствует об оптимальности найденной равновесной структуры комплексов.

Результаты расчетов используются для анализа механизма переноса электрона с красителя на наночастицы полупроводника.

1. О.В. Сизова, В.В. Сизов. Ж. Структ. Хим., 47, № 6, 1034, 2006.
2. Н. Adams, W. Alsindi, G. Davies, M. Durisk, T. Easun, H. Fenton, J-M. Herrera, M. George, K. Ronayne, X-Z. Sun, M. Towrie, M. Ward, J. Chem. Soc., Dalton Trans., 2006, 39–50.

ОСОБЕННОСТИ АСИМПТОТИЧЕСКИХ РАЗЛОЖЕНИЙ АНИЗОТРОПНЫХ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВБЛИЗИ СИНГУЛЯРНОЙ СФЕРЫ. МОДЕЛЬНЫЙ СЧЁТ ДЛЯ O₂ И ПАРАТЕРФЕНИЛА

Штифанюк П.П., Федоряко А.П.

Институт сцинтилляционных материалов
НТК «Институт монокристаллов» НАН Украины

Проведено исследование дальнедействующей составляющей коэффициентов $SO(3)$ -инвариантных разложений анизотропных межмолекулярных взаимодействий (U -коэффициентов) для леннард-джонсовских взаимодействий между силовыми центрами (атомами). Для сингулярных потенциалов степенного типа проведен анализ сходимости асимптотического представления U -коэффициентов и их применимости для построении статистической механики анизотропных сред. На примере молекул O_2 и паратерфенила численно исследуются качественное поведение и сходимость U -коэффициентов в окрестности сингулярной сферы.

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ QSAR

Лях Д.И., Пантелеймонов А.В., Иванов В.В., Холин Ю.В.

Харьковский Национальный университет имени В. Н. Каразина

Статистические модели типа “структура-активность” (quantitative structure-activity relationships, QSAR) получили большое распространение в различных химических дисциплинах. Так, например, практическое создание новых соединений с лекарственным эффектом невозможно без привлечения, на определенных стадиях, математических (статистических, квантовохимических) моделей. Такие модели строятся на основе комплексного анализа доступных экспериментальных данных и позволяют, в принципе, прогнозировать свойства еще не синтезированных соединений. Большое значение подходы QSAR имеют в проблеме оценки токсических эффектов (токсикология, экотоксикология). Здесь статистические модели позволяют оценить такие параметры как токсичность, мутагенность, канцерогенность и факторы биоконцентрации молекулярных систем, для которых недостаточны или вовсе отсутствуют соответствующие экспериментальные данные. В проблематике QSAR для установления искомых структурно-химических зависимостей используется множество подходов. Однако особенность современных исследований такова, что в конкретных разработках, как правило, используется довольно “узкий” спектр методов (регрессия или докинг и т.д.). Вместе с тем, очевидно, что применение к данной проблеме всего арсенала средств QSAR дает возможность найти “оптимальный” тип модели, гарантирующей решение задачи. В связи с этим нами разработан комплекс программ, позволяющий построить множество различных статистических моделей, которые описывают данный тип активности. Среди них линейный и нелинейный методы наименьших квадратов (**LS**, **NLS**). В случае, когда число параметров много больше числа объектов, неполный метод наименьших квадратов (**PLS**) может оказаться более адекватным. Программа **FACTOR** позволяет провести анализ главных компонент с целью выявления наиболее важных дескрипторов или их линейных комбинаций. Для проведения классификации по степеням активности нами реализован метод дискриминантного (дискриминационного) анализа, **DA**. Модуль **CoMFA** в сочетании с распространенным квантовохимическим пакетом **GAMESS** реализует метод сравнительного анализа молекулярных полей. Комплекс также включает программы, позволяющие создать аддитивную схему (**ADD**), провести кластерный анализ и исследование на основе теории нечетких множеств (**FUZZY**).

РАСПРОСТРАНЕНИЕ СОЛИТОНОВ В АКТИВНО-ДИССИПАТИВНОЙ СРЕДЕ, КАК ПРОБЛЕМА ОТОБРАЖЕНИЯ

А.С.Ковалев, А.А.Перетяцько

Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина,
Физико-технический институт низких температур НАН Украины, Харьков

При использовании солитонов в системах передачи информации (магнитные линии задержки и оптические световоды) для их стабилизации при наличии диссипации необходимо активное воздействие на систему (пространственно распределенное или точечное). В указанных нелинейных средах стандартным является описание малоамплитудной нелинейной динамики в рамках возмущенного нелинейного уравнения Шредингера:

$$i\partial\psi/\partial t + \partial^2\psi/\partial x^2 - \omega_0\psi + |\psi|^2\psi = R(\psi, x, t), \quad (1)$$

где переменная ψ связана с распределением намагниченности или электромагнитного поля. При пространственно распределенном внешнем воздействия возмущение в (1) имеет вид $R = -i\gamma\psi + h\exp(-i\omega t)$, где γ - затухание, а (h, ω) - амплитуда и частота внешнего ВЧ - поля. В случае дискретной системы активных элементов с расстоянием L между усилителями $R = -i\gamma\psi + \sum h\exp(-i\omega t)\delta(x - Ln)$. Распространение солитонов через такую систему сводится к последовательному прохождению через отдельные элементы с отрезком диссипативной среды длиной L и точечным активным элементом. Заменой $\psi = \sqrt{2}u(x, t)\exp(-i\omega_0 t)$ (1) сводится к уравнению
$$i\partial u/\partial t + \partial^2 u/\partial x^2 + 2|u|^2 u = -i\gamma u + h\delta(x - L)\exp(-i(\omega - \omega_0)t). \quad (1)$$
 В

невозмущенной среде солитонное решение этого уравнения имеет вид

$$u_s = 2i\eta \exp(-2i\xi x - i\varphi) \operatorname{sech}[2\eta(x - \zeta)], \quad (2)$$

где $\varphi = 4(\xi^2 - \eta^2)t + \varphi_0$, $\zeta = -4\xi t + \zeta_0$, амплитуда солитона $A = 2\eta$, его скорость $V = -4\xi$, частота в лабораторной системе отсчета $\Omega = 4(\xi^2 - \eta^2)$ и в системе, движущейся со скоростью солитона, $\tilde{\Omega} = -4(\xi^2 + \eta^2)$, φ_0 и ζ_0 - фазы, характеризующие внутренние колебания и положение центра солитона. Считая воздействия на систему малыми ($\gamma \ll 1, h \ll 1$), воспользуемся адиабатической теорией возмущения для солитонов. При этом получаем точечное отображение исходных параметров солитона при $x = 0$ и $t = 0$: $\eta_0, \xi_0, \varphi_0, \zeta_0$ на его параметры при $x = L$ и $t = T = L/V_0$:

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \eta_0 - \gamma L \eta_0 / 2\xi_0 + h\pi \cos \alpha_1 / 8\xi_0, \quad \xi_1 = \xi_0, \quad \zeta_{01} = \zeta_0 - h\pi \sin \alpha_1 / 4\xi_0^2 \eta_0, \\ \varphi_{01} &= \varphi_0 + hC \cos \alpha_1 8\xi_0^2, \quad \Omega_1 = \Omega_0 - h\pi \eta_0 \cos \alpha_1 / \xi_0 \end{aligned} \quad (3)$$

с $\alpha_1 = \varphi_0 - \tilde{\Omega}_0 T$. В результате последовательных отображений (mapping) солитон усиливается при фазировке поля накачки или (без фазировки) усиливается стохастически.

Работа поддержана грантом РФФИ и НАН Украины № 8-2009.

ПЕРЕХОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ДИХОТОМНЫХ ФЛУКТУАЦИЯХ: ДИФфуЗИОННЫЙ ТРАНСПОРТ В ВЯЗКОЙ СРЕДЕ

Шапочкина И.В.¹, Розенбаум В. М.²

¹ Белорусский государственный университет, Минск

² Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины, Киев

Дихотомные процессы, при которых система попеременно пребывает в двух состояниях, широко распространены в природе и используются как упрощающее предположение при описании объектов различного уровня сложности. Переходы между состояниями дихотомного процесса обычно считаются мгновенными, что оправдано, если время перехода τ_0 много меньше всех характерных времен системы τ_s . Свойства описываемых систем существенно изменяются при нарушении этого условия. Исследования таких свойств представляют интерес, поскольку переходные процессы часто сказываются на поведении измеряемых величин.

Мы рассмотрели влияние конечности времени τ_0 на среднюю скорость $\langle v \rangle$ броуновского мотора, приводимого в движение дихотомными флуктуациями периодической (с периодом L) потенциальной энергии $U(x, t) = u(x) + \sigma(t)w(x)$. Для чисто дихотомного симметричного процесса $\sigma(t) = \pm 1$, $\langle \sigma \rangle = 0$, а средняя длительность каждого состояния задается временем $\tau/2$ (τ – период процесса). Характерным временем системы является время диффузии $\tau_s = L^2/D$ (D – коэффициент диффузии). Известно, что при $\tau \gg \tau_s$ $\langle v \rangle \propto \tau^{-1}$ [1]. Учет переходных процессов длительностей τ_0 дает тот же результат при $\tau_0 \ll \tau_s \ll \tau$ и другое асимптотическое поведение при $\tau_s \ll \tau_0 < \tau$, а именно, $\langle v \rangle \propto \tau^{-2}$. В приближении большой вязкости среды [2] приводятся зависимости $\langle v \rangle$ от параметров τ_0 и τ ($\tau_0 < \tau$) во всем диапазоне их изменения от нуля до бесконечности.

1. J.M.R.Parrondo, Phys. Rev. E **57**, 7297 (1998).

2. В. М. Розенбаум, Письма в ЖЭТФ **88**, 391 (2008).

ХАОТИЧЕСКИЕ РЕЖИМЫ АФМР В ДВУМЕРНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ $(\text{NH}_3)_2(\text{CH}_2)_4\text{MnCl}_4$.

Е.Н. Хацько, М.М. Богдан, М.И. Кобец,

Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина НАНУ

Экспериментально наблюдаются и проанализированы хаотические режимы поглощения СВЧ-поля в двумерном металлоорганическом антиферромагнетике $(\text{NH}_3)_2(\text{CH}_2)_4\text{MnCl}_4$ при низких температурах в условиях нелинейного антиферромагнитного резонанса. Подробно исследованы релаксационные колебания поглощаемой мощности. Найдены частотные спектры этих колебаний, их частотно-амплитудные характеристики и зависимости поглощаемой мощности от накачки и постоянного магнитного поля. Показано, что в динамике релаксационных колебаний происходит переход к хаосу в соответствии со сценарием через «нерегулярные периоды». Последовательно описываются особенности этого перехода, в частности, определяются условия возникновения режимов поглощения с шипообразной и пилообразной структурой сигнала, а также рассчитываются характеристики хаотических осцилляций, такие как размерности странных аттракторов. Выясняется, что хаотическая динамика в изученном антиферромагнетике является многомерной с сильным вкладом шума, имеющего детерминистическую природу.

Показано, что релаксационные колебания поглощаемой мощности возникают при очень низких уровнях энергии СВЧ-поля и имеют очень маленькую частоту основной гармоник

Рассчитаны количественные характеристики странного аттрактора. Одномерное отображение, соответствующее данному аттрактору, демонстрирует тенденции регулярного движения, несмотря на хаотическое временное поведение релаксационных колебаний. Анализ корреляционной размерности свидетельствует о многомерной хаотической динамике и детерминистической природе шума в изучаемой магнитной системе. Рассмотрена возможность формального разделения регулярного движения и шумового вклада с помощью развиваемых нелинейных методов уменьшения влияния шумов.

Кратко обсуждена применимость теоретической модели конечного числа связанных спинов, находящихся под воздействием параметрической и перпендикулярной накачки, для построения количественной теории сценария перехода к хаосу через "нерегулярные периоды", который может рассматриваться как универсальное явление в низкоразмерных ферро- и антиферромагнетиках в условиях нелинейных резонансов.

ОБМЕННЫЙ СДВИГ ПОЛЕВОЙ ЗАВИСИМОСТИ НАМАГНИЧЕННОСТИ В ДВУХСЛОЙНОЙ МОДЕЛИ ФЕРРОМАГНЕТИКА

М.Л.Панкратова, А.С.Ковалев, А.Г. Гречнев

Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина,
Физико-технический институт низких температур НАН Украины, Харьков

Для описания обменного сдвига (exchange bias) кривой намагниченности в магнитном поле H двухслойной системы ферро/антиферромагнетик рассмотрена простая модель, в которой ферромагнитная подсистема состоит из 2 атомных слоев. АФМ считается магнито - жестким материалом (его спины фиксированы), а внешнее поле - меньшим поля спин-флоп перехода в АФМ. В пленке ФМ не учитывается магнитная анизотропия. Вдоль границы раздела состояние считается однородным, а граница АФМ - некомпенсированной. Сильная легко-плоскостная анизотропия «укладывает» спины в плоскость, в которой магнитные свойства изотропны. При этом модель становится скалярной и описывается двумя углами поворота спинов в ФМ слоях от направления спинов в АФМ, совпадающим с направлением H : φ_1 и φ_2 . (Слой (1) контактирует с АФМ). Энергия ФМ-системы и взаимодействия через интерфейс равна

$$E = -J_0 \cos \varphi_1 - J \cos(\varphi_1 - \varphi_2) - H(\cos \varphi_1 + \cos \varphi_2),$$

где J и J_0 - константы обменного взаимодействия ФМ слоев между собой и через интерфейс. Равновесным коллинеарным (К) и антиколлинеарным (АК) спиновым конфигурациям отвечают значения $\varphi_i = 0, \pm \pi$, но возможны также «скошенные» фазы (СК) с $\varphi_i \neq 0, \pm \pi$. В них

$$\cos \varphi_1 = \frac{4I^2 h + (1 - h^2)^2}{2I(1 - h^2)(1 + h)}, \quad \cos \varphi_2 = \frac{4I^2 h - (1 - h^2)^2}{2I(1 - h^2)(1 - h)}, \quad \text{где } h = 2H / J_0 + 1, \quad I = 2J / J_0.$$

Зависимость намагниченности ФМ подсистемы от поля h в (СК) фазе имеет вид (в (К) фазах $M = \pm 2$, а в (АК) фазе $M = 0$):

$$M = \cos \varphi_1 + \cos \varphi_2 = h \left(4I^2 - (1 - h^2)^2 \right) / \left(I(1 - h^2)^2 \right)$$

Из полученных результатов следует, что (i) зависимость $M(H)$ «обменно сдвинута», (ii) на ней имеются области наклонных участков кривой намагниченности, не связанные с кинетикой перемагничивания и определяемые (СК) фазами и (iii) возможно существование «полочек» с постоянным значением намагниченности, связанных с (АК) фазой. Полученные результаты могут служить одним из объяснений экспериментально наблюдаемых полевых зависимостей в многослойных магнитных системах.

Работа поддержана грантом РФФИ и НАН Украины № 8-2009.

РАМАНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ В КРИСТАЛЛЕ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ $(\text{CuSO}_4)(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)\cdot 2\text{H}_2\text{O}$

*Ванькевич А.В., Таранова И.А., Андерс А.Г., Кравчина О.В.**

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина,

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина НАНУ

Кристаллы металлоорганических соединений являются прекрасными модельными объектами при изучении природы и механизмов фазовых переходов, магнитных взаимодействий в низкоразмерных системах, динамики водородной связи и т.д. Это в первую очередь обусловлено возможностью "внедрять" в цепочки металлов различные по составу и величине органические комплексы с большим разнообразием водородных связей.

В настоящей работе представлены результаты анализа температурного поведения фундаментальных колебаний кристалла $(\text{CuSO}_4)(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)\cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Метод исследования - рамановское рассеяние света.

Структуру кристалла можно представить в виде цепочек меди, разделенных хелатными комплексами этилендиамина. Первые исследования данного кристалла показали, что при низких температурах наблюдаются проявления обменного взаимодействия между ионами меди, находящимися в соседних цепочках [1]. Такой обмен, по мнению авторов, может осуществляться через органический комплекс этилендиамина. Для подтверждения предложенной гипотезы было изучено температурное поведение "внешних" и "внутренних" колебаний хелатного комплекса $\text{Cu}-(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)$ в кристалле. Известно, что хелатные комплексы этилендиамина в кристаллах имеют так называемую *гош*-форму. Согласно данным теоретико-группового анализа, при комнатной температуре должны наблюдаться все внутренние колебания хелатного кольца. Однако линия, связанная с внутренним колебанием ν_3 -типа группы CH_2 , в рамановских спектрах отсутствует и начинает проявляться при температурах ниже 170 К. Также было обнаружена аномально низкая интенсивность линии, связанной с колебанием атомов углерода в хелате. По мере понижения температуры интенсивность линии, также как и ее частота, возрастает, а ее полуширина аномально понижается. При температуре ~ 75 К аномальные изменения параметров линии прекращаются. Анализ полученных данных позволил предположить, что при комнатной температуре возможны перескоки атомов углерода без изменения симметрии *гош*-формы хелатного кольца. Получены энергии активации таких перескоковых процессов.

[1]. Kajnakova M., Orendach M., Orendachova A., Vlcek A., Cernak J., Kravchyna O.V., Anders A.G., Balanda M., Park J.H., Feher A., Meisel M.W., Phys.Rev.B-2005.-Vol.71.-P.014435.

ВЛИЯНИЕ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ НА РОСТ НАНООКСИДОВ ПЛАТИНЫ И ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С МОЛЕКУЛЯРНЫМ ВОДОРОДОМ

Гатин А. К., Гришин М. В., Шарова М. В.

Институт химической физики им. Н.Н.Семёнова РАН, Москва

В высоковакуумных экспериментах методом «нанолаборатории» изучено влияние сильных электрических полей, созданных острием СТМ, на рост, модификацию и разрушение оксидов наноплатины, на их взаимодействия с молекулярным водородом. Установлены и интерпретированы зависимости скоростей окисления платины от приложенного к контакту напряжения, в том числе, от его полярности. Продемонстрирована возможность стимулированных полем обратимых изменений атомного строения оксидных фаз. Впервые обнаружены зависящие от полярности приложенного напряжения, ускоренные полем затухающие автоколебания химических реакций, идущих при взаимодействии молекулярного водорода с наноксидами. Полученные результаты, моделирующие влияние зарядов малых металлических частиц на их каталитическую активность, вводят в теорию нанесенных катализаторов новый размерный параметр, определяющий максимальные размеры наночастиц, реакционная способность которых зависит от локальных электрических полей.

THERMAL BEHAVIOUR OF SINGLE CRYSTALS OF DEUTERATED AMMONIUM PERCHLORATE

Majda D ^a., Korobov A ^b., Filek U ^c., Sulikowski B ^c., Midgley P ^d., Vowles D ^{d,e}.,
Klinowski J ^d.

^aJagiellonian University, Krakow, Poland

^bV.N. Karazin Kharkov National University

^cInstitute of Catalysis and Surface Chemistry, Krakow, Poland

^dUniversity of Cambridge, UK

^eMonash University, Australia

Long known and widely used in rocket propellants, ammonium perchlorate is still the object of quite intensive research, both applied and fundamental. Recent literature indicates a new increase of activity in searching more efficient catalysts to facilitate its thermal decomposition. This time the main focus is on nano-catalysts of various nature. This, in turn, recurs to some gaps in understanding the mechanism of thermal decomposition; in particular, the "arrest" of the reaction when conversion is about 30% with the formation of a porous product. Many of the experimental and theoretical studies favour the proton transfer hypothesis [1]. However, recent *ab initio* MD simulations indicate no proton transfer in the ideal crystal structure [2,3].

An additional insight into the mechanism may be made by comparing the thermal behaviour of conventional and deuterated samples. Surprisingly, the literature on thermal decomposition of deuterated ammonium perchlorate is fairly limited. Comparative SEM, DSC, TG and QMS results for the low-temperature decomposition of deuterated and non-deuterated samples have been presented in Ref. 4. Now similar results are obtained for partly deuterated samples NH_3DClO_4 and compared with previous results. Mixed samples are shown to be more reactive than completely deuterated and non-deuterated samples. Phase transition is at the same temperature for all samples confirming that the crystal structure is the same. Thermal decomposition of all samples always begins inside the crystals, not on their faces. In all cases it stops when the conversion is about 30%, giving porous products. Results obtained are best rationalized as being due to proton transfer at the intersection of dislocations inside crystals.

[1] V. V. Boldyrev, *Thermochim. Acta*, 2006, 443, 1.

[2] L. Rosso and M. E. Tuckerman, *Solid State Ion.*, 2003, 161, 219.

[3] L. Rosso and M. E. Tuckerman, *Pure Appl. Chem.*, 2004, 76, 49.

[4] D. Majda, A. Korobov, U. Filek, B. Sulikowski, P. Midgley, D. Vowles, J. Klinowski, *Chem. Phys. Lett.*, 2008, 454, 233.

ЭФФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ В КОЛЕБАНИЯХ РЕШЕТКИ $\text{Ln}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$

Безносков А.Б., Логинов А.А.

Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина
Национальной академии наук Украины, Харьков

Ионы лантанидов (Ln) присутствуют в химических формулах многих соединений, привлекающих в последнее время, повышенное внимание (напр. купратов, манганитов, ферритов). Состояния $4f$ – оболочек катионов Ln в таких системах существенно определяются влиянием кристаллических полей (КП), создаваемых ближайшими к ним анионами. В термодинамических функциях соединений появляются слагаемые, приводящие к характерным эффектам температурной эволюции их свойств. Мы рассчитали температурную поправку к упругому модулю кристаллической решетки перовскитоподобного манганита $(\text{Nd}_{0.9}\text{Y}_{0.1})_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$, обладающего колоссальным магниторезистивным эффектом, обусловленную зависимостью параметров КП от межатомного расстояния. Полученное выражение для такого вклада в температурную зависимость модуля Юнга имеет вид $E(T)=E(0)-A \cdot W(T)$ (здесь $W(T)$ – зависящая от температуры плотность энергии КП; A – числовой параметр, зависящий от $E(0)$, параметра ангармоничности колебаний решетки и параметра Грюнайзена для данного КП). В качестве затравочного спектра энергий КП использован спектр, рассчитанный для иона Nd^{3+} в родственном соединении NdGaO_3 в [1]. Удовлетворительное согласие с экспериментом [2] достигнуто путем обращения и сужения в 1.7 раза мультиплета [1]. Полученные параметры зависимости $E(T)$ имеют вид $E(0)=154.8$ ГПа, $A=1.15 \cdot 10^3$ (величина $W(T)$ при этом должна быть выражена в ГПа). Полученный результат показывает, что кристаллические поля на ионах Ln в рассматриваемых соединениях приводят к ярко выраженным эффектам в температурной эволюции динамических характеристик кристаллической решетки в температурной области $0 < T < 200$ К. Можно ожидать, что перенормировка фононного спектра, вызванная температурным изменением заселенности энергетических уровней КП, заметно отразится, также, на величине параметра электрон-фононного взаимодействия.

1. A. Podlesnyak, S. Rosenkranz, F. Fauth, W. Marti, A. Furrer, A. Mirmelstein, H. J. Scheel, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **5**: 8973 (1993).
2. А.Б. Безносков, Е.Л. Фертман, П.П. Паль-Валь, В.А. Десненко, В.Б. Красовицкий, А.Б. Ринкевич, А.П. Носов, В.Г. Васильев, *Известия АН, Сер. Физическая*, **66**: 761 (2002).

НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.2}\text{Mn}_{1.2}\text{O}_3$: ЭФФЕКТЫ МЯГКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ В УЛЬТРААКУСТИКЕ

Безносов А.Б.¹, Паль-Валь П.П.¹, Фертман Е.Л.¹, Паль-Валь Л.Н.¹,
Пащенко А.В.², Пащенко В.П.²

¹Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина
Национальной академии наук Украины, Харьков

²Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина Национальной
академии наук Украины, Донецк

Интерес к сложному перовскитоподобному оксиду $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.2}\text{Mn}_{1.2}\text{O}_3$, содержащему «избыточный» сверхстехиометрический марганец, обусловлен присутствием в его химической формуле ионов Mn^{2+} , Mn^{3+} и Mn^{4+} , что разнообразит свойства соединения по сравнению с обычными (без Mn^{2+}) манганитами [1]. Колоссальный магниторезистивный эффект, являющийся главной причиной повышенного интереса к этому классу соединений, существенно связан с взаимодействием между системой квазилокальных электронов и кристаллической решеткой, динамика которой привлекает, в этой связи, повышенное внимание. Мы исследовали температурное поведение упругих характеристик $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.2}\text{Mn}_{1.2}\text{O}_3$ на частоте 74 кГц в температурном интервале $5 < T < 30$ К, с целью выявления характера возбужденных состояний кристаллической решетки в низкоэнергетической области спектра. Обнаружено, что в области 5-20 К скорость V и затухание δ продольного звука подчиняются линейным зависимостям: $V = 4698 - 4.35T$ м/с, $\delta = (1.1 + 0.33T) \cdot 10^{-3}$ (Т – температура в градусах Кельвина). Такой результат принципиально расходится с представлениями о низкотемпературной термодинамике совершенных кристаллов, однако может быть успешно интерпретирован в модели «мягких атомных потенциалов» [2], как «релаксационный вклад гармонических осцилляторов» в вещественную и мнимую компоненты динамического упругого модуля, соответственно. Аналогичные эффекты в динамике ионной системы можно ожидать, также, в нестехиометрических оксидах меди, испытавших низкотемпературный бездиффузионный структурный переход, порождающий большое число хаотически распределенных упругих напряжений в кристаллической решетке.

Работа поддержана грантом НАН Украины № 3-026/2004 программы «Наносистемы, наноматериалы та нанотехнології», договор №1/07-Н.

1. В. П. Пащенко, А. А. Шемяков, И. В. Жихарев и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**: 1567 (2005).
2. Д. А. Паршин, *ФТТ*, **36**: 1809 (1994).

NEW LIQUID CRYSTALLINE SYSTEMS EXHIBITING BLUE PHASES

Shkolnikova N.I., Gella I.M., Kutulya L.A.

STC “Institute for Single Crystals”, National Academy of Sciences of Ukraine,

The blue phases, considered and investigated usually just like ones of fascinating and exotic liquid crystalline states, renew attention of researchers due to their promising application as tunable photonic crystals and for display technologies [1-3].

Main factors of formation of the blue phases are generally assumed to be a certain extent of chirality of a chiral compound as well as elastic constants of the liquid crystal composition and surface conditions (see, for example [4-7])

We present new liquid crystalline systems exhibiting blue phases. The mixture containing cyanobiphenyls and nematic esters was used as a host nematic phase. The 2,5-*bis*-substituted isosorbides were employed as chiral dopants. The factors influencing on the formation and temperature range of the blue phases, namely, the helical twisting power of chiral dopants, the character of temperature dependences of the helical pitch and the selective light reflection are discussed.

- [1]. H. J. Coles and M. N. Pivnenko // *Nature*, **436**, pp. 997–1000, 2005.
- [2]. Heinz-S. Kitzerow // *ChemPhysChem*, **6**, pp. 1–5, 2005.
- [3]. Atsushi Yoshizawa // *Journal of SID*, **16** (12), pp. 1189–1194, 2008.
- [4]. G. Voets and W. Van Dael // *Liq. Cryst*, **14** (3), pp. 617–627, 1993.
- [5]. R.J. Miller and H.F. Gleeson // *Liq. Cryst*, **14** (6), pp. 2001–2011, 1993.
- [6]. G. Petriashvili, D. Sikharulidze, A. Chanishvili, and G. Chilaya // *Crystallogr. Rep.*, **44** (5), pp. 847–851, 1999.
- [7]. G. Heppke, H.-S. Kitzerow, D. Löttsch and Ch. Papenfuß // *Liq. Cryst*, **8** (3), pp. 407–418, 1990.

УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

д.ф.-м.н., проф. Андерс Александр Георгиевич
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл.Свободы, 4
Тел.: 38 (057) 707-55-49
Alexander G.
Anders@univer.kharkov.ua

д.х.н., зав. лаб. Багатурьянц Александр Александрович
Центр фотохимии РАН
ул. Новаторов 7а, Москва 119421
Тел.: 7 (495) 936-2588
Факс: 7 (495) 936-1255
E-mail: sasha@photonics.ru

д.х.н., проф. Базилевский Михаил Викторович
Центр фотохимии РАН
ул. Новаторов 7а, Москва 119421
Тел.: 7-495-9350115
Факс: 7-495-9361255
E-mail: Basil@photonics.ru

студ. Барышников Глеб Владимирович
Черкасский национальный университет имени Б. Хмельницкого
18031, г.Черкасы, б. Шевченка, 81
Тел.: 38 (0472) 37-65-76
Факс: 38 (0472) 35-44-63
E-mail: bfmin@rambler.ru

к.ф.-м.н., с.н.с. Безносков Анатолий Борисович
Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАНУ
пр. Ленина, 47, Харьков 61103,
Тел.: +38-057-341-09-03
Факс: +38-057-345-05-93
E-mail: beznosov@ilt.kharkov.ua

асп. Белов Александр Сергеевич
Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1.
Тел.: +7(495)9391286
Факс +7(495)9391286
E-mail asbelov@list.ru

м.н.с. Беляева Елена Александровна
Донецкий национальный технический университет
83000, Донецк, ул. Артема, 58
Тел.: 38(050)227-63-49
E-mail: eabelyaeva@mail.ru

д.ф.-м.н. Богдан Михаил Михайлович
Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАНУ
Харьков 61103, пр. Ленина 47
Тел.: 38(057)341 09 39
Факс: 38(057)345 05 93
E-mail: bogdan@ilt.kharkov.ua

д.ф.-м.н. Болотин Юрий Львович
Институт теоретической физики Национального научного центра "Харьковский физико-технический институт"
Харьков 61108, Академическая 1
Тел.: 38(057)733-23-19
E-mail bul@datasvit.net

к.х.н., с.н.с. Бреславская Наталья Николаевна
Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН
119991 Москва, Ленинский пр., 31
Тел.: +7-916-186-59-82
Факс: 8-495-954-19-79
E-mail: breslav@igic.ras.ru

к.ф.-м.н., с.н.с. Ванькевич Александр Викторович
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: 38-057-707-56-30
Alexander.V.Vankevich@univer.kharkov.ua

д.х.н., проф. Высоцкий Юрий Борисович
Донецкий национальный технический университет,
83000, Донецк, ул. Артема, 58
Тел.: 38(050)227-63-49
E-mail: yuvysot@cable.netlux.org

д.ф.-м.н., проф. Гандель Юрий Владимирович
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина,
пл. Свободы, 4, Харьков 61077
Тел.: 38(050)707 52 02
E-mail: gandel@univer.kharkov.ua

инж. Гатин Андрей Константинович
Институт химической физики имени Н.Н.Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: 7-495-9397259
Факс: 7-495-1378273
E-mail: akgatin@rambler.ru

к.ф.-м.н., с.н.с. Гришин Максим Вячеславович
Институт химической физики имени Н.Н.Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: 7-495-9397259
Факс: 7-495-1378273
E-mail: grishin@chph.ras.ru

к.х.н., с.н.с. Гелла Иван Михайлович
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина,
НТК «Институт монокристаллов»,
61001, Харьков, пр. Ленина, 60,
Тел.: +38-057-3410323
Факс: +38-057-3409343
E-mail: ivan.m.gella@univer.kharkov.ua

асп. Глебов Илья Олегович
Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет,
19991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1;
Тел.: +7(495)9391286
Факс +7(495)9391286
E-mail: glebov_io@mail.ru

д.ф.-м.н. в.н.с. Голубков Геннадий Валентинович
Институт химической физики имени Н. Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: 7 (495) 9397322
E-mail: golubkov@chph.ras.ru

к.ф.-м.н. с.н.с. Голубков Максим Геннадиевич
Институт химической физики имени Н. Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: 7 (495) 9397137
E-mail: golubkov@chph.ras.ru

к.х.н., с.н.с. Гребенюк Анатолий Георгиевич
Институт химии поверхности имени А. А. Чуйко НАН Украины
ул. Генерала Наумова, 03164 Киев
Тел.: 38 (044) 422-96-60
E-mail: grebenyuk_ag@ukr.net

к.ф.-м.н. Гречнев Алексей
Геннадиевич
Физико-технический институт низких
температур им. Б. И. Веркина НАНУ
61103, пр.Ленина 47, Харьков
Тел.: +(380) 57 340-21-05
Факс: +(380) 57 340 33 70
E-mail: kovalev@ilt.kharkov.ua

д.х.н., проф., чл.-корр. РАН Гудилин
Евгений Алексеевич
Московский Государственный
Университет имени М.В. Ломоносова,
факультет наук о материалах,
19991, Москва, Ленинские горы, дом
1, строение 3, ГСП-1
Тел.: +7(495)9394729
Факс +7(495)9390998
E-mail: goodilin@inorg.chem.msu.ru

д.ф.-м.н., зав.лаб. Далидчик Федор
Иванович
Институт химической физики
имени Н. Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
E-mail: dalidchik@chph.ras.ru

к.х.н., зав. лаб. Долин Сергей
Петрович
Институт общей и неорганической
химии имени Н.С. Курнакова РАН
119991 Москва, Ленинский пр., 31
Тел.: +7-985-795-70-78
Факс: 7-495-954-19-79
E-mail: dolin@igic.ras.ru

д.х.н. проф. Дьячков Павел
Николаевич
Институт общей и неорганической
химии имени Н.С. Курнакова РАН
119991 Москва, Ленинский пр., 31
Тел.: 8 903 2011976
E-mail: p_dyachkov@rambler.ru

к.ф.-м.н., доц. Езерская Елена
Владимировна
Харьковский национальный
университет имени В.Н.Каразина
61077, Харьков, пл.Свободы, 4
Тел.: 707-54-30
E-mail: ezer@univer.kharkov.ua

д.ф.-м.н., проф. Еремин Вадим
Владимирович
Московский Государственный
Университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет,
19991, Москва, Ленинские горы, дом
1, строение 3, ГСП-1
Тел.: +7(495)9391286
Факс +7(495)9391286
E-mail: vv_er@mail.ru

к.х.н., доц. Еремина Елена Алимовна
Московский Государственный
Университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет,
19991, Москва, Ленинские горы, дом
1, строение 3, ГСП-1
Тел.: +7(495)9394609
Факс +7(495)9390998
E-mail: eremina@inorg.chem.msu.ru

к.х.н. Жикол Олег Анатольевич
НТК "Институт монокристаллов"
НАН Украины
61001, Харьков, пр. Ленина, 60
Тел.: 38(057)341-02-58
E-mail: zhikol@xray.isc.kharkov.com

д.ф.-м.н., проф., акад. РАН Захаров
Владимир Евгеньевич
University of Arizona,
Физический институт имени
Лебедева,
119991 Москва, Ленинский пр., 53
Тел.: +7-495-1326751
E-mail: zakharov@math.arizona.edu

к.х.н., доц. Иванов Владимир
Венедиктович
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: +38-057-707-52-45
E-mail: vivanov@univer.kharkov.ua

д.ф.-м.н. г.н.с. Иванов Геннадий
Константинович
Институт химической физики
имени Н. Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: 7 (495) 9397137
E-mail: genivan@chph.ras.ru

PhD Kajňaková Marcela
Faculty of Science,
P.J. Šafárik University at Kosice
Park Angelinum 9, 04154 Kosice,
Slovak Republic
Tel.: +421-55-2346113
E-mail: marcela.kajnakova@upjs.sk

ScD, Prof. Klinowski Jacek
Cambridge University, Chemistry
Department, Lensfield Road,
Cambridge CB2 1EW, UK
Тел.: +44 1223 336514
E-mail: jk18@cam.ac.uk

к.х.н., доц. Калугин Олег Николаевич
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: 38-057-7075556
E-mail: chemdean@univer.kharkov.ua,
onkalugin@gmail.com

асп. Клименко Татьяна
Александровна
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: +38-057-707-51-95
E-mail: Generalchem@mail.ru

к.ф.-м.н. Кобец Михаил Иванович
Физико-технический институт низких
температур им. Б. И. Веркина НАНУ
Харьков 61103, пр. Ленина 47
Тел.: 38 (057) 341 08 20
Факс: 38 (057) 345 05 93
E-mail: khatsko@ilt.kharkov.ua

д.ф.-м.н., проф. Ковалев Александр
Семенович
Физико-технический институт низких
температур им. Б. И. Веркина НАНУ
61103, пр. Ленина 47, Харьков.
Тел.: +(380) 57 340-21-05
Факс: +(380) 57 340 33 70
E-mail: kovalev@ilt.kharkov.ua

д.ф.-м.н., проф. Кожушнер Мортко
Аврумович
Институт химической физики
имени Н. Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: +7-495-9397137
Факс: +7-499-1378273
E-mail: ma_kozhushner@yahoo.com

д.х.н., проф. Коробов Александр
Исаакович
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: +38-057-707-51-29
Alexander.I.Korobov@univer.kharkov.ua

д.ф.-м.н., проф. Кошкин Владимир
Моисеевич
НТУ "Харьковский Политехнический
Институт"
Харьков 2, ул. Фрунзе, 21
Тел.: 38 (057) 7076327;
E-mail: vkosh@online.kharkov.ua

м.н.с. Кравченко Алексей Андреевич
Харьковский национальный
университет имени В.Н. Каразина
61077, Харьков, пл.Свободы, 4
Тел.: 38(057)707-53-52
Aleksey.a.kravchenko@univer.kharkov.ua

д.х.н. проф. Кутуля Лидия Антоновна
НТК "Институт монокристаллов"
НАНУ
61001, Харьков, пр. Ленина, 60,
Тел.: +38-057-3410315
E-mail: kutulya@isc.kharkov.com

д.х.н., проф. Левин Александр
Аронович
Институт общей и неорганической
химии имени Н.С. Курнакова РАН
119991 Москва, Ленинский пр., 31
Тел.: 7-916-605-90-13
E-mail: levin@igic.ras.ru

к.х.н., доц. Литинский Григорий
Борисович
НТУ "Харьковский Политехнический
Институт"
61034, Харьков, Полтавский шлях, 192
Тел.: 38 (057) 700 19 31
E-mail: litinskii@yandex.ru

д.х.н., проф. Лобанов Виктор
Васильевич
Институт химии поверхности
имени А. А. Чуйко НАН Украины
ул. Генерала Наумова, 03164 Киев
Тел.: 38 (044) 424-94-72
E-mail: lobanov_victor@isc.gov.ua

к.ф.-м.н., с.н.с. Логинов Александр
Александрович
Физико-технический институт низких
температур им. Б. И. Веркина НАНУ
пр. Ленина, 47, Харьков, 61103
Тел.: +38-057-341-09-78
Факс: +38-057-3450593
E-mail: loginov@ilt.kharkov.ua

д.ф.-м.н., проф. Лузанов Анатолий
Витальевич
НТК " Институт Монокристаллов"
НАНУ,
пр. Ленина 60, Харьков, 61001.
Тел.: 38 (057) 341 02 58
Факс: 38 (057) 340 44 74
E-mail: luzanov@xray.isc.kharkov.com

м.н.с. Лях Дмитрий Иванович
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: 38 (057) 7075129
E-mail: lyakh@univer.kharkov.ua

PhD Majda Dorota
Jagiellonian University,
Ingardena 3, 30-060 Krakov, Poland
E-mail: majda@chemia.uj.edu.pl

к.ф.-м.н., доц. Матвеев Владимир
Викторович
Санкт-Петербургский
государственный университет
198504, Санкт-Петербург,
Петродворец, Ульяновская 1
Тел.: +7 (812) 4284643
E-mail: vmatveev@esr.phys.spbu.ru

д.х.н., проф. Минаев Борис
Филиппович
Черкасский национальный
университет имени Б. Хмельницкого
18031, Черкасы, б. Шевченко, 81
Тел.: 38 (0472) 37-65-76
Факс: +38 (0472) 35-44-63
E-mail: bfmin@rambler.ru

к.ф.-м.н., с.н.с. Михайлова Татьяна
Юрьевна
Институт общей и неорганической
химии имени Н.С. Курнакова РАН
119991 Москва, Ленинский пр., 31
Тел.: +7-916-605-90-13
Факс: +7-495-954-19-79
E-mail: tttat@yandex.ru

д.х.н., проф. Михейкин Игорь
Дмитриевич
Московский Государственный
Университет Инженерной Экологии
105066, Москва, ГСП, Старая
Басманная ул., д. 21/4
Тел.: 7 (499) 267-19-60
E-mail: mickhei@rambler.ru

д.ф.-м.н. проф. Нацик Василий
Дмитриевич
Физико-технический институт низких
температур им. Б. И. Веркина НАНУ
пр. Ленина, 47, Харьков 61103,
Тел.: 38 (057) 335-07-63
E-mail: natsik@ilt.kharkov.ua

к.х.н. Нерух Дмитрий Александрович
Cambridge University, Chemistry
Department, Lensfield Road,
Cambridge CB2 1EW, UK
Тел.: +44 1223 336325
E-mail: dn232@cam.ac.uk

д.х.н. проф. Новиков Юрий
Николаевич
Институт элементоорганических
соединений им. А.Н. Несмеянова
119991, Москва, ул. Вавилова, 28
Тел.: 7 (499) 135-92-13
Факс 7 (499) 135-50-85
E-mail: novik@ineos.ac.ru

д.ф.-м.н., проф. Норман Генри
Эдгарович
Объединенный институт высоких
температур РАН
125412 Москва, ул. Ижорская, 2, корп. 13
E-mail: norman@ihed.ras.ru

д.ф.-м.н., проф. Оболенский Михаил
Александрович
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: +38-057-707-52-61
Mikhail.A.Obolenskii@univer.kharkov.ua

к.ф.-м.н., с.н.с. Паль-Валь Лидия
Никитична
Физико-технический институт низких
температур им. Б. И. Веркина НАНУ
пр. Ленина, 47, Харьков, 61103
Тел.: +38-057-3410913
Факс: +38-057-3450593
E-mail: palval@ilt.kharkov.ua

д. ф.-м. н., проф. Паль-Валь Павел
Павлович
Физико-технический институт низких
температур им. Б. И. Веркина НАНУ
пр. Ленина, 47, Харьков, 61103
Тел.: +38-057-3410913
Факс: +38-057-3450593
E-mail: palval@ilt.kharkov.ua

студ. Панкратова Марина Леонидовна
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
E-mail: kovalev@ilt.kharkov.ua

м.н.с. Пантелеймонов Антон
Витальевич
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: 38 (057) 707-52-45
panteleimonov@univer.kharkov.ua

к.ф.-м.н., с.н.с. Пащенко Алексей
Валентинович
Донецкий физико-технический
институт имени А. А. Галкина НАНУ
ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 83114
Тел.: +38-062-3115293
Факс: +38-062-3379018
pashchen@pashchen.fti.ac.donetsk.ua

д. т. н., проф. Пашченко Валентин Павлович
Донецкий физико-технический институт имени А. А. Галкина НАНУ
ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 83114
Тел.: +38-062-3115293
Факс: +38-062-3379018
pashchen@pashchen.fti.ac.donetsk.ua

д.ф.-м.н. с.н.с. Переверзев Юрий Владимирович
Department of Chemistry,
University of Washington
Seattle, WA 98195, USA
Тел.: (206) 685 3596
Факс: (206) 685 8665
E-mail: yuriyp@u.washington.edu

асп. Перетятко Анастасий Александрович
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
E-mail: kovalev@ilt.kharkov.ua

д.ф.-м.н., проф. Песчанский Валентин Григорьевич
Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАНУ
Харьков 61103, пр. Ленина, 47
Тел.: 38 057 341 09 80
Факс: 38 057 345 05 93
E-mail: vpeschansky@ilt.kharkov.ua

PhD Пржедо Олег Викторович
University of Washington,
Department of Chemistry
Seattle, WA 98195-1700, USA
Тел.: +1 206 354-5341
Факс +1 206 685-8665
E-mail: prezhd@u.washington.edu

PhD, Senior Researcher Ritter Clemens
Institut Laue-Langevin
BP 156, Grenoble Cedex 9, France
Tel.: +33 (0)4 76 20 7460
Fax: + 33 (0)4 76 48 39 06
E-mail: ritter@ill.fr

д.ф.-м.н. Розенбаум Виктор Михайлович
Институт химии поверхности имени А. А. Чуйко НАН Украины
ул. Генерала Наумова, 03164 Киев
Тел.: 8 050 624-38-85
E-mail: vik-roz@mail.ru

инж. Симон К. В.
Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Университетский пр. 26

д.х.н. проф. Стародуб Владимир Александрович
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: 38 (057) 707 55 70
E-mail: starodub@univer.kharkov.ua

д.х.н., проф. Тарасенко Юрий Александрович
Институт химии поверхности имени А. А. Чуйко НАН Украины
ул. Генерала Наумова, 03164 Киев
Тел.: +38 (044) 4229602
E-mail: bakalin@isc.gov.ua

м.н.с. Теребинская Мария Ивановна
Институт химии поверхности имени А. А. Чуйко НАН Украины
ул. Генерала Наумова, 03164 Киев
Тел.: 38 (044) 422-96-60
E-mail: terebinska_m.i@bigmir.net

д.ф.-м.н., проф. Трахтенберг Леонид
Израйлевич
Институт химической физики
имени Н. Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: 7 (495) 916-1209
E-mail: trakh@ccnifhiac.ru

д.х.н., проф., акад. РАН Третьяков
Юрий Дмитриевич
Московский Государственный
Университет имени М.В. Ломоносова,
факультет наук о материалах,
19991, Москва, Ленинские горы, дом
1, строение 3, ГСП-1
Тел.: +7(495)9392074
Факс +7(495)9390998
E-mail: goodilin@inorg.chem.msu.ru

д.ф.-м.н., проф. Тулуб Александр
Владимирович
Санкт-Петербургский
государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Старый
Петергоф, Университетский пр. 26
E-mail: tulub@nk7099.spb.edu

д.ф.-м.н. Тур Анатолий Валентинович
Center D'etude Spatiale Des
Rayonnements C.N.R.S.
31028 Toulouse, av.Colonel-
Roche,France
E-mail: anatoly.tour@cesr.fr

д.ф.-м.н., зав. лаб. Уманский
Станислав Яковлевич
Институт химической физики
имени Н. Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: +7 495 313 60 11
E-mail: unan43@mail.ru

DSc, Prof. Feher Alexander
Faculty of Science,
P.J. Šafárik University at Kosice
Park Angelinum 9, 04154 Kosice,
Slovak Republic
Tel.: +421-55-2346107
Fax: +421-55-6222124
E-mail: alexander.feher@upjs.sk

к. ф.-м. н., н.с. Фертман Елена
Леонидовна
Физико-технический институт низких
температур им. Б. И. Веркина НАНУ
пр. Ленина 47, Харьков 61103
Тел.: +38-057-3410903
Факс: +38-057-3450593
E-mail: fertman@ilt.kharkov.ua

д.ф.-м.н., проф. Франк-Каменецкий
Максим Давидович
Center of Advanced Biotechnology and
Department of Biomedical Engineering
Boston University,
Boston MA 02215, USA
E-mail: mfk@bu.edu

д.ф.-м.н. Хацько Евгений Николаевич
Физико-технический институт низких
температур им. Б. И. Веркина НАНУ
Харьков 61103, пр. Ленина 47
Тел.: 38 (057) 341 09 20
E-mail: khatsko@ilt.kharkov.ua

д.х.н. проф. Холин Юрий
Валентинович
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: 38 (057) 7075143
E-mail: kholin@univer.kharkov.ua

асп. Чабан Виталий Витальевич
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: 38 (057) 7075183
E-mail: vvchaban@gmail.com

д.ф.-м.н., проф. Черановский
Владислав Олегович
Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина
61077, Харьков, пл. Свободы, 4
Тел.: 38 (057) 707-53-52
E-mail:
cheranovskii@univer.kharkov.ua

д.ф.-м.н., проф. Чижик Владимир
Иванович
Санкт-Петербургский
государственный университет,
физический факультет
198504, С-Петербург, Петродворец,
ул. Ульяновская, д.1
Тел.: +7 812 4287559
Факс: +7 812 4287240
E-mail: chizhik@esr.phys.spbu.ru ,
vchizhik@mail.ru

ст. преп. Шапочкина Ирина
Викторовна
Белорусский государственный
университет, физический факультет
Минск, 220030, пр.Независимости, 4
Тел.: +375-17-209 51 21
E-mail: spooky_@tut.by

инж. Шарова Марина Валентиновна
Институт химической физики
имени Н. Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: 74991378273
Факс: 74991378273
E-mail: sharova@chph.ras.ru

к.х.н., н.с. Школьников Наталия
Ивановна
НТК «Институт монокристаллов»
НАНУ
61001, Харьков, пр. Ленина, 60
Тел.: +38-057-3410421
Факс: +38-057-3409343
E-mail: nataly@isc.kharkov.com

к.ф.-м.н. Штифанюк Петр Петрович
НТК «Институт монокристаллов»
НАНУ
61001, Харьков, пр. Ленина, 60
Тел.: 38 (057) 341-03-58
E-mail: shtefanyuk@mail.ru,
petro@isc.kharkov.com

д.х.н., проф. Шуб Борис Рувимович
Институт химической физики
имени Н. Н. Семенова РАН
119991 Москва, ул. Косыгина 4
Тел.: +7 4991378273
E-mail shub@chph.ras.ru

д.ф.-м.н., зав. отд. Яновский
Владимир Владимирович
НТК "Институт монокристаллов"
НАНУ
61001, Харьков, пр. Ленина, 60
Тел.: 38 (057) 341-03-39
E-mail: yanovsky@isc.kharkov.ua

д.х.н., проф. Яцимирский Виталий
Константинович
Киевский национальный университет
имени Т. Шевченко
Киев, Владимирская 64
Тел.: (044) 2393202, 2850265
E-mail: yats@univ.kiev.ua ;
yats@i.com.ua

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Basilevsky M.V., 12
Davidovich G.V., 12
Feher A., 52
Fertman E.L., 52
Filek U., 73
Frank-Kamenetskii M., 56
Grebenyuk A.G., 62
Kajnakova M., 52
Klinowski J., 73
Majda D., 73
Midgley P., 73
Nerukh D., 24
Norman G., 39
Pereverzev Y.V., 32
Prezhdo O. V., 18, 32
Ritter C., 52
Ryabov V., 24
Sulikowski B., 73
Taiji M., 24
Tikhomirov V.A., 12
Titov S.V., 12
Voronin A.I., 12
Vowles D., 73

Адья А.К., 20
Андерс А.Г., 51, 71

Багатурьянц А.А., 16
Базилевский М.В., 12
Барышников Г.В., 64
Безносков А.Б., 52, 74, 75
Белов А.С., 30
Беляева Е. А., 27
Биков Д.О., 63
Богдан М.М., 69
Болотин Ю.Л., 34
Бреславская Н.Н., 58

Ванькевич А.В., 71
Вовк М.А., 22
Высоцкий Ю. Б., 27

Галбова О., 37
Гандель Ю. В., 45
Гатин А. К., 72
Гелла И.М., 76
Герасимюк И.П., 47
Глебов И. О., 31
Голубков Г.В., 33
Голубков М.Г., 33
Гречко Л.Г., 47
Гречнев А.Г., 70
Гришин М. В., 72
Гудилин Е.А., 46

Далидчик Ф.И., 53
Дацюк А.М., 63
Діюк В.Є., 63
Долин С. П., 19, 58
Донец А.В., 22
Дьячков П.Н., 17

Евтушенко Н.Е., 47
Егоров А.В., 22
Езерская Е.В., 40
Еремин В.В. 31, 29, 30, 46
Еремина Е.А., 46

Жикол О. А., 25

Задерко О.М., 63
Зиолковский Д., 51

Иванов В.В., 26, 60, 61, 66
Иванов Г.К., 33
Йоханссон М., 43

Калугин О.Н., 20, 21
Кириченко О.В., 37
Клименко В.Е., 47
Клименко Т. А., 61
Кобец М.И., 69
Ковалев А.С., 43, 67, 70
Кожушнер М.А., 14

Коробов А. И., 57, 73
Кошкин В.М., 42
Кравченко А.А., 40
Кравчина О.В., 71
Кутуля Л.А., 76
Куць В.С., 47

Лапко В.Ф., 47
Левин А. А., 19, 58
Литинский Г. Б., 41
Лобанов В.В., 54, 55, 63
Логинов А.А., 74
Лузанов А. В., 25
Лысенко А.А., 47
Лях Д. И., 60, 66

Матвеев В.В., 23
Минаев Б.Ф., 64
Минаева В.А., 64
Михайлова Т. Ю., 19, 58, 59
Михейкин И. Д., 44
Назик В.Д., 36
Новиков Ю.Н., 49
Норман Г.Э., 39

Оболенский М.А., 11

Павлова М.С., 22
Паль-Валь Л.Н., 75
Паль-Валь П.П., 75
Панкратова М.Л., 70
Пантелеймонов А.В., 66
Пащенко А.В., 75
Пащенко В.П., 75
Перетятко А.А., 67
Песчанский В.Г., 37
Пупышев В.И., 59

Розенбаум В. М., 38, 68

Саkun В. П., 44
Симон К. В., 28
Стародуб В. А., 50

Таранова И.А., 71

Тарасенко Ю.А., 47
Теребинская М.И., 55
Трахтенберг Л.И., 13, 14
Третьяков Ю.Д., 46
Тулуб А.В., 28
Тур А.В., 35

Уманский С.Я., 15

Федоряко А.П., 65
Фертман Е.Л., 75
Франк-Каменецкий М., 56

Хацько Е.Н., 69
Холин Ю.В., 66

Чабан В.В., 21
Черановский В.О., 40
Чижик В.И., 22

Шапочкина И.В., 68
Шарова. М. В., 72
Школьников Н.И., 76
Штифанюк П.П., 65
Шуб Б.Р., 53

Яновский В.В., 35
Яцимирський В.К., 63

Наукове видання

ДИНАМІКА І СТРУКТУРА У ФІЗИЦІ ТА ХІМІЇ
Збірник тез доповідей Міжнародної наукової конференції,
присвяченої 70-річчю І. В. Кривошея (1939-1995)

Харків, 25 – 28 травня 2009 р.

Українська, англійська, російська мови
Тези доповідей публікуються в авторській редакції

Відповідальний за випуск О. І. Коробов

Дизайн обкладинки І.М. Дончик
Комп'ютерна верстка О.І. Коробов

Підписано до друку 12.05.2009. Формат 60х84/16.

Друк ризографічний, папір офсетний.

Ум.–друк. арк. 4.64. Обл.–вид. арк. 5.81.

Наклад 100 примірників. Ціна договірна.

61077, м. Харків, пл. Свободи, 4
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
Видавництво Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна

Надруковано: ХНУ імені В. Н. Каразіна
61077, м. Харків, пл. Свободи, 4.
Тел.: 705-24-32

Свідоцтво про державну реєстрацію ДК № 33667 від 13.01.09